Abhandlungen
der Heidelberger Akademie der Wissenschaften
Stiftung Heinrich Lanz
Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse
Abt. A
12. Abhandlung

Über den Zusammenhang zwischen der Struktur und den morphologischen Merkmalen des Diamanten

Von

ERNST MOHR

Vorgelegt von Herrn WÜLFING in der Sitzung vom 31. Mai 1924



Berlin und Leipzig 1924
WALTER DE GRUYTER & CO.
vormals G. J. Göschen'sche Verlagshandlung / J. Guttentag, Verlagsbuchhandlung
Georg Reimer / Karl J. Trübner / Veit & Co.

Abhandlungen
der Heidelberger Akademie der Wissenschaften
Stiftung Heinrich Lanz
Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse
Abt. A
12. Abhandlung

Über den Zusammenhang ... Struktur und den ...hen Merkmalen ...amanten

Druckfehlerverzeichnis.

42, linke Spalte, Zeile 16 v. u. lies „Lage der" statt „Lage de".

42, linke Spalte, Zeile 7 v. u. lies „Schnitt parallel" statt „Schnittparallel".

. 42, rechte Spalte, Zeile 14 v. u. lies „(331)+(313)+(133)+(133)" statt „{331}+(313)+(133)".

S. 43, linke Spalte, Zeile 11 und 13 v. o. lies „zueinander stehende" statt „zueinanderstehende".

S. 43, rechte Spalte, Zeile 6 v. o. lies „S. 34" statt „S. 33–34".

S. 43, rechte Spalte, Zeile 14 v. o. lies „Abbildung" statt „Abbildungen".

Auf Tafel IX müssen die Abbildungen 91 und 92 miteinander vertauscht werden.

Von

... MOHR

...n der Sitzung vom 31. Mai 1924



Berlin und Leipzig 1924
WALTER DE GRUYTER & CO.
vormals G. J. Göschen'sche Verlagshandlung / J. Guttentag, Verlagsbuchhandlung
Georg Reimer / Karl J. Trübner / Veit & Co.

Abhandlungen
der Heidelberger Akademie der Wissenschaften
Stiftung Heinrich Lanz
Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse
Abt. A
12. Abhandlung

Über den Zusammenhang zwischen der Struktur und den morphologischen Merkmalen des Diamanten

Von

ERNST MOHR

Vorgelegt von Herrn WÜLFING in der Sitzung vom 31. Mai 1924



Berlin und Leipzig 1924
WALTER DE GRUYTER & CO.
vormals G. J. Göschen'sche Verlagshandlung / J. Guttentag, Verlagsbuchhandlung
Georg Reimer / Karl J. Trübner / Veit & Co.

I. Abschnitt.

Bau des Diamantraumgitters.

Aus den bekannten Versuchen von W. H. und W. L. Bragg folgt, daß die Schwerpunkte der Kohlenstoffatome des Diamanten zwei ineinandergestellte, kubische, flächenzentrierte Raumgitter bilden, die künftig die I. und II. Komponente des Diamantraumgitters genannt werden sollen. Abb. 1 [1]), aus der man sich zunächst die Verbindungsstäbe zwischen den Kugeln hinwegdenken möge, zeigt in schiefer Projektion den Umriß je eines Elementarwürfels einer jeden der beiden Raumgitterkomponenten und die Lage der 28 zu diesen Würfeln gehörigen Atomschwerpunkte (Kugeln). Bezeichnet man, wie es in der vorliegenden Abhandlung durchweg geschieht, die Kantenlänge eines Elementarwürfels mit $4d$, so kommen die Atomschwerpunkte der einen Komponente mit denen der anderen zur Deckung, wenn man die eine Komponente in der Richtung einer räumlichen Diagonale des Elementarwürfels um $d \cdot \sqrt{3}$, d. h. um ein Viertel der Länge dieser Diagonale gegen die andere Komponente verschiebt.

Das aus zwei Komponenten zusammengesetzte Diamantraumgitter kann man als ein einheitliches Gitter auffassen, das aus Elementarwürfeln der durch Abb. 3 dargestellten Art aufgebaut ist. In dieser Abbildung ist zwecks besserer Übersichtlichkeit der Elementarwürfel in acht kleine Würfel zerlegt; ferner sind die vier im Innern des Elementarwürfels liegenden Atomschwerpunkte, deren jeder im Mittelpunkte eines solchen kleinen Würfels liegt, zur besseren Kennzeichnung ihrer Lage durch punktierte Linien miteinander verbunden, die ein reguläres Tetraëder begrenzen. Näheres über diesen und andere ähnliche Elementarwürfel, die alle die Kantenlänge $4d$ haben, s. S. 5 ff.

In der Nähe eines jeden Atomschwerpunkts stehen im Diamantgitter in gleichem Abstande $d \cdot \sqrt{3}$ vier Atomschwerpunkte, die dem zuerst erwähnten näher stehen als alle anderen, und um ihn so verteilt sind wie die Ecken eines Tetraëders um den Tetraëderschwerpunkt. Die Verbindungslinien eines jeden Atomschwerpunktes mit seinen vier nächst benachbarten bezeichnen sehr wahrscheinlich die Richtungen der zwischen den einzelnen Atomen wirkenden Anziehungskräfte, die zweifellos mit den chemischen Valenzen identisch sind. Stellt man sie durch Stäbe dar (Abb. 1), so erhält man ein aus Kekuléschen Kohlenstoffatommodellen aufgebautes Diamantraumgittermodell. Alle Kohlenstoffatommodelle, die derselben Raumgitter-

[1]) Betreffs der Bezeichnung der Atomschwerpunkte in der Abb. 1 vgl. S. 5. Aus Gründen der Raumersparnis sind in allen Abbildungen die Symbole etwas einfacher als im Text dieser Abhandlung geschrieben; z. B.: 422 statt [4; 2; 2]. Den nach den Angaben von S. 4 ff. gezeichneten Grundriß [Projektion auf (001)] der 28 Atommodelle zeigt Abb. 2.

komponente angehören, stehen parallel zueinander. Sie werden denen der anderen Komponente parallel, wenn man sie z. B. um eine Würfelkante um 90° oder um eine Rhombendodekaëdernormale um 180° dreht.

Die Berechtigung der Verwendung der KEKULÉschen Kohlenstoffatommodelle oder der VAN 'T HOFFschen Tetraëder (s. u.) zum Aufbau des Diamantraumgittermodells folgt aus einer Untersuchung JOHNSENS[1]), nach welcher die Kohlenstoffatome im Diamant mindestens hexakistetraëdrische Symmetrie haben müssen.

2. Abschnitt.

Projektionen des Diamantraumgittermodells auf die Würfel-, Rhombendodekaëder- und Oktaëderfläche.

Wenn man noch keine genügend klare und im Gedächtnis leicht reproduzierbare Vorstellung des Diamantraumgitters hat, sind bei vielen Überlegungen Raumgittermodelle unentbehrlich. Leider sind solche Modelle meist nicht sehr groß. Für manche Betrachtungen sind jedoch Raumgitterstücke nötig, die sehr viele Atommodelle umfassen. In solchen Fällen sind die Projektionen des Raumgittermodells auf die Würfel-, Oktaëder- oder Rhombendodekaëderfläche von großem Nutzen. Die in den folgenden Abschnitten erwähnten Deckoperationen können an den Raumgitterprojektionen ebensogut verfolgt werden wie am Modell, manche Untersuchungen, wie z. B. die Ermittelung der Lage der dreizähligen Schraubenachsen, sogar viel sicherer und bequemer, als am Modell. Bei der Anfertigung der im 6. Abschnitt (S. 18ff.) beschriebenen Abbildungen von Krystallmodellen usw. sind Raumgitterprojektionen vollkommen unentbehrlich.

Besonders bequem ist eine gelegentlich bereits verwendete[2]) Projektion auf die Würfelfläche (Abb. 4), bei welcher jedes Kohlenstoffatom durch ein VAN 'T HOFFsches Tetraëder[3]) dargestellt wird. Die hier nicht sichtbaren Verbindungslinien des Tetraëderschwerpunkts mit den Tetraëderecken sind die Richtungen der vier Kohlenstoffvalenzen. Jedes Tetraëder berührt mit jeder seiner vier Ecken eine Ecke eines anderen Tetraëders derart,

---

[1]) A. JOHNSEN, Physik. Ztschr. **16**, 269 [1915]; Jahrbuch der Radioaktivität und Elektronik, Band XIV, Heft 1, S. 111 [1917].

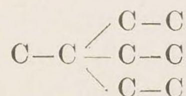
[2]) ERNST MOHR, Die BAEYERsche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten; Hdlbg. Akad. d. Wiss.; math.-nat. Kl., 1915, 7. Abh.; Journ. f. prakt. Chem. [2] **98**, 340 [1918].

[3]) VAN 'T HOFF benutzt in seinem Werke „Die Lagerung der Atome im Raume" 3. Aufl. [1908] nebeneinander zwei voneinander total verschiedene Tetraëdermodelle. In beiden Modellen liegt der Schwerpunkt des Kohlenstoffatoms im Schwerpunkt des Tetraëders. Bei dem einen Modell liegen in den Ecken des Tetraëders die Schwerpunkte der vier an dieses Kohlenstoffatom gebundenen Atome. Es ist also, genau betrachtet, gar kein „Atommodell"; denn zwei durch eine einfache Bindung miteinander verknüpfte Kohlenstoffatome müssen bei Benutzung dieses Tetraëdermodells, je nachdem ob sie spiegelbildlich oder invers zueinander stehen, durch die in Abbildung 5 und 6 abgebildeten Modelle dargestellt werden. Zur Darstellung zweier durch eine Doppelbindung miteinander verknüpfter Kohlenstoffatome ist dieses Modell recht wenig geeignet, wie die von VAN 'T HOFF hierfür gegebene Abb. 7 deutlich zeigt. Von anderen Autoren scheint dieses Tetraëdermodell nie verwendet worden zu sein, sondern immer nur dasjenige, welches man erhält, wenn man die Enden der Valenzstäbe eines KEKULÉschen Kohlenstoffatommodells durch gerade Linien verbindet. Dieses Atommodell ist in größerem Umfange z. B. von J. WISLICENUS in seiner bekannten Abhandlung „Über die räumliche Anordnung der Atome in organischen Molekülen und ihre Bestimmung in geometrisch-isomeren ungesättigten Verbindungen" (Abh. d. math.-phys. Klasse d.

daß jede Ecke das Symmetriezentrum der beiden sich hier berührenden Tetraëder ist. Jedes Tetraëder erscheint bei der Projektion auf die Würfelfläche als Quadrat mit einer Diagonale; die zweite, nicht eingezeichnete Diagonale ist die Projektion der einzigen hier nicht sichtbaren Tetraëderkante. Die Quadrate ohne Diagonalen sind Lücken im Netz. Die Schwerpunkte der in der Abb. 4 eingezeichneten Tetraëder sind auf verschiedene Ebenen verteilt, die parallel zur Ebene des Papiers liegen. Die Schwerpunkte der mit 0 bezeichneten Tetraëder liegen in der x,y-Ebene, die Schwerpunkte der mit 1 bezeichneten um d höher, die der mit 2 bezeichneten in der Ebene $z = 2d$ und so fort. Die Bezeichnungen 0, 1, 2 und 3 geben also nach der Multiplikation mit der Strecke d den Abstand des betreffenden Tetraëderschwerpunkts von der x,y-Ebene in der Richtung der z-Achse an. Da die Kantenlänge des Elementarwürfels gleich $4d$ ist, liegen in den Abständen $4d$, $8d$, $12d\ldots$ über und unter jedem Tetraëder des Grundrisses (Abb. 4) parallelstehende Tetraëder. Soll also dieser Grundriß ein in der Richtung der z-Achse unbegrenztes Stück des Diamantraumgitters darstellen, so muß man sich statt 0, 1, 2 und 3 die Ausdrücke $4n$, $4n+1$, $4n+2$ und $4n+3$ eingetragen denken, wobei n jede beliebige positive oder negative ganze Zahl oder Null sein kann. Das Symbol eines Atommodells, dessen Schwerpunkt die Koordinaten $x = +4d$, $y = -2d$, $z = +6d$ sind, sei $[4;\ \bar{2};\ 6]$.

In der vorliegenden Abhandlung wird das Koordinatenachsenkreuz immer so gestellt, daß ein Atomschwerpunkt im Punkte [0; 0; 0] und einer seiner Nachbarn im Punkte [1; 1; 1] liegt, dagegen keiner im Punkte $[\bar{1};\ \bar{1};\ \bar{1}]$.

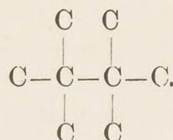
Da jeder Atomschwerpunkt, der in einer der Ecken des Elementarwürfels des Diamantraumgitters (Abb. 3) liegt, auch noch sieben anderen Elementarwürfeln angehört, so entfällt von ihm auf jeden Elementarwürfel, wenn man so sagen darf, nur ein Achtel. Ebenso gehört jeder auf der Mitte einer Elementarwürfelfläche liegende Atomschwerpunkt jedem Würfel nur zur Hälfte an. Der in Abb. 3 dargestellte Elementarwürfel umfaßt also $\frac{8}{8} + \frac{6}{2} + 4$, das sind zusammen soviel wie acht ganze Atomschwerpunkte. Für manche Betrachtungen ist es erwünscht, den Elementarwürfel so zu begrenzen, daß er nur „ganze" Atomschwerpunkte umfaßt. Der Grundriß eines Würfels solcher Art ist in der Abb. 2 ein zwecks besserer Übersichtlichkeit nicht eingezeichnetes Quadrat, dessen Ecken in den Punkten A, B, C und D liegen. Diesem Würfel gehören die acht Schwerpunkte [0; 0; 0], [1; 1; 1], [2; 2; 0], [3; 3; 1], [2; 0; 2], [3; 1; 3], [0; 2; 2] und [1; 3; 3] an; seine obere Fläche liegt also im Niveau $z = +\frac{7}{2}d$, seine untere im Niveau $z = -\frac{1}{2}d$. Dieser Komplex von acht Atomschwerpunkten hat, wie die Abb. 1 und 17 zeigen, die „chemische Strukturformel"



und nur die Symmetrieelemente der ditrigonal-pyramidalen Klasse. Höhere Symmetrie, nämlich die der ditrigonal-skalenoëdrischen Klasse, hat der Komplex (vgl. Abb. 1): [2; 0; 2],

Kgl. Sächs. Ges. d. Wiss. **14**, 1 [1887]) benutzt worden und wird in der chemischen Literatur auch jetzt noch sehr häufig verwendet. Die oben erwähnten drei Atomkombinationen (Abb. 5 bis 7) geben bei Benutzung dieses Kohlenstoffatommodells die in den Abb. 8, 9 und 10 dargestellten Modellkomplexe. In der vorliegenden Abhandlung ist unter „van 't Hoffschem Tetraëder" oder „van 't Hoffschem Kohlenstoffatommodell" immer nur das zuletzt erwähnte Tetraëder (Abb. 8 bis 10) zu verstehen.

[3; 1; 3], [4; 0; 4], [4; 2; 2], [2; 2; 4], [1; 1; 5], [3; 3; 5] und [1; 3; 3]; seine „chemische Konstitutionsformel“ ist



Auch der Grundriß dieses Elementarwürfels ist zwecks besserer Übersichtlichkeit in Abb. 2 nicht eingezeichnet; er ist ein Quadrat, dessen Ecken in den Punkten E, F, G und H liegen. Die obere Fläche dieses Elementarwürfels liegt im Niveau $z = +\frac{11}{2}d$, seine untere im Niveau $z = +\frac{3}{2}d$.

Die Kohlenstoffatome einer Raumgitterkomponente sind nicht durch Valenzen miteinander verbunden. Sie stehen untereinander wahrscheinlich gar nicht in unmittelbarer Verbindung; näheres s. S. 16. Die einzige zweifellos sichere Verbindung, die zwischen ihnen besteht, sind die Atome der anderen Komponente.

Der besondere Vorzug der durch Abb. 1 dargestellten Diamantraumgittermodelle und der analogen Raumgitterprojektionen (Abb. 2, 4, 11—15) besteht darin, daß sie die Verknüpfung eines jeden Kohlenstoffatoms mit seinen nächsten Nachbarn zeigen, eine Beziehung, die für die Untersuchung des Baues der Diamantkrystallmodelle (vgl. Abschnitt 6) wichtig ist, die aber fast vollkommen verborgen bleibt, wenn man nur die Atomschwerpunkte und die Kanten der Elementarwürfel zur Darstellung bringt.

In der vorliegenden Abhandlung ist, wenn nichts anderes gesagt wird, die Stellung des Elementarwürfels zu den Atomschwerpunkten die in Abb. 3 angegebene.

Stellt man bei der Projektion des Diamantraumgittermodells auf die Oktaëderfläche (111) die Kohlenstoffatome durch VAN 'T HOFFsche Tetraëder dar (Abb. 11), so liegt eine Fläche eines jeden Tetraëders parallel zur Projektionsebene. Mit x', y' und z' sind die Projektionen der drei Koordinatenachsen bezeichnet. Das in der Mitte der Abb. 11 liegende Atommodell, dessen eine Ecke auf den Beschauer gerichtet ist, ist das Atommodell [4; 4; 4]; es verdeckt teilweise das Modell [1; 1; 1], von dem man nur drei Ecken sieht. Vollkommen unsichtbar ist natürlich [0; 0; 0], das durch [4; 4; 4] ganz verdeckt wird; vgl. hierzu Abb. 17.

Den Schnitt durch das in Abb. 11 dargestellte Raumgittermodell, welcher senkrecht auf der Ebene des Papiers der Abb. 11, d. h. senkrecht auf (111) steht und diese Ebene in der Geraden $+z'$, $-z'$ schneidet, zeigt Abb. 12. Das ist also ein durch den Koordinatenanfangspunkt [0; 0; 0] des Diamantraumgittermodells parallel zur Rhombendodekaëderfläche $(1\bar{1}0)$ gelegter Schnitt. Zur bequemeren Orientierung ist die z-Achse in Abb. 12 strichpunktiert eingezeichnet. Die Bezeichnung der Atommodelle mit den Symbolen [0; 0; 0], [0; 0; 4] usw. stimmt mit der Bezeichnung in Abb. 17 überein. Die Umrisse derjenigen Atommodelle, deren Schwerpunkte in der Ebene des Papiers der Abb. 12 liegen, sind ausgezogen, die Umrisse der hinter der Ebene des Papiers liegenden Modelle sind punktiert eingezeichnet. In Abb. 11 ist in jeden Tetraëderumriß eine Zahl eingeschrieben, die, multipliziert mit h, der Hälfte der Höhe b eines VAN 'T HOFFschen Tetraëders, den Abstand angibt, in dem der Schwerpunkt des betreffenden Tetraëders über dem Niveau 0 liegt. Dieses Niveau 0 ist die durch den Atomschwerpunkt [0; 0; 0] parallel zur Oktaëderfläche (111) gelegte Ebene; vgl. hierzu die

Höhenskala am rechten Rande der Abb. 12. Bedeutet d, wie hier immer, ein Viertel der Kantenlänge des Elementarwürfels, so ist

$$h = \frac{b}{2} = \frac{d}{\sqrt{3}} \cdot$$

Die Abb. 11 und 12 sind in demselben Maßstabe gezeichnet, und zwar ist in Abb. 12 das durch die Atomschwerpunkte [0; 0; 0] und [0; 0; 4] begrenzte Stück der z-Achse gleich $4d$ (vgl. Abb. 17). In Abb. 11 ist der Umriß eines jeden VAN 'T HOFFschen Tetraëders ein gleichseitiges Dreieck von der Seitenlänge $d\sqrt{2}$. In Abb. 11 sind die im Niveau 0 liegenden Tetraëder nicht sichtbar, da sie senkrecht unter den im Niveau 12 stehenden Modellen liegen und zwar parallel zu letzteren. Wie Abb. 12 zeigt, kommt das Raumgittermodell nach Verschiebung um $12\,h = 4\,d\sqrt{3}$ in der Richtung der räumlichen Diagonale des Elementarwürfels zum ersten Male mit sich selbst zur Deckung. In Abb. 12 ist das durch die Atomschwerpunkte [0; 0; 0] und [4; 4; 4] begrenzte Stück der Achse A_1 die Länge der räumlichen Diagonale des Elementarwürfels und der soeben erwähnten Verschiebung; vgl. auch Abb. 17.

Soll die Abb. 11 ein in der Richtung senkrecht zur Ebene des Papiers unbegrenztes Raumgitterstück darstellen, so sind statt der speziellen Bezeichnungen 3, 4, 7, 8, 11 und 12 die allgemeineren Ausdrücke $(12\,n + 3)$, $(12\,n + 4)$, $(12\,n + 7)$, $(12\,n + 8)$, $(12\,n + 11)$ und $12\,n$ einzusetzen; hier bedeutet n jede beliebige, positive oder negative, ganze Zahl oder Null.

Zu Abb. 12 ist noch folgendes zu bemerken. Die Geraden NN und MM sind Spuren von Ebenen, die parallel zur Oktaëderfläche (111) bzw. $(11\bar{1})$ liegen und senkrecht auf der Ebene des Papiers der Abb. 12 stehen. A_1, A_2 und A_3 sowie B_1, B_2 und B_3 sind dreizählige Achsen der einfachen und sechszählige der zusammengesetzten Symmetrie; mit J sind die in der Ebene der Abb. 12 liegenden Symmetriezentren, mit H die in der Ebene der Abb. 12 liegenden Schnittpunkte der Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse bezeichnet; näheres hierüber s. im 3. Abschnitt, S. 10 und S. 11.

Die in Abb. 11 eingezeichneten und mit r bzw. l bezeichneten, kleinen Kreise sind einige der Punkte, in denen die senkrecht auf (111) stehenden dreizähligen, rechts- bzw. linksgängigen Schraubungsachsen die Bildebene durchstoßen. Da diese Achsen zu dem hier behandelten Gegenstande in keiner näheren Beziehung stehen, ist ihre Besprechung wohl überflüssig.

Auch die Besprechung der senkrecht und parallel zu den Rhombendodekaëderflächen stehenden, zweizähligen Schraubungsachsen soll hier aus demselben Grunde unterbleiben. Die Einzeichnung der Lage dieser Achsen in Abb. 12 würde die Übersichtlichkeit allzusehr vermindern.

Projektionen des Diamantraumgitters, die für manche Zwecke recht bequem sind, erhält man, wenn man sich das Raumgitter nicht aus VAN 'T HOFFschen Tetraëdern, sondern aus KEKULÉschen Atommodellen aufgebaut denkt. Die Abb. 13, 14 und 15 sind solche Projektionen auf (001), (110) und (111); sie sind alle in demselben Maßstabe gezeichnet. Die hier weggelassene Bezifferung der Atomschwerpunkte richtet sich nach dem jeweils vorliegenden Zwecke. Alles hierzu nötige kann den Abb. 4, 11, 12 und 17 entnommen werden. Die gestrichelten Linien in Abb. 13 und 14 sind die Projektionen der Kanten eines Elementarwürfels von der in Abb. 3 dargestellten Art (je ein Atomschwerpunkt in jeder Würfelecke). Da in Abb. 15 die Projektionen der Kanten des Elementarwürfels mit Projektionen von Valenzstäben einiger KEKULÉscher Atommodelle zusammenfallen, sind hier die Projektionen aller Atomschwerpunkte, die dem oben erwähnten Elementarwürfel angehören, durch je zwei konzentrische Kreise kenntlich gemacht.

3. Abschnitt.

Die Lage der Achsen und Ebenen der einfachen und der zusammengesetzten Symmetrie im Diamantraumgitter.[1])

Da der Hauptzweck der vorliegenden Untersuchung die Konstruktion kleiner Diamantkrystallmodelle ist, deren größtes höchstens einige wenige Tausend Atommodelle enthalten soll, brauchen die Gleitspiegelebenen und Schraubenachsen nicht berücksichtigt zu werden. Die übrigen Symmetrieelemente (Achsen und Ebenen der einfachen und der zusammengesetzten Symmetrie, sowie Symmetriezentren) werden hier als bekannt vorausgesetzt und nur hinsichtlich der Lage ihrer Schnittpunkte untersucht. Man kann sie nach diesem Gesichtspunkte in zwei Gruppen zusammenfassen, nämlich in die der hexakistetraëdrischen und die der ditrigonal-skalenoëdrischen Klasse.

Lage und Schnittpunkte der Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse im unbegrenzten Diamantraumgitter.

Zunächst soll hier gezeigt werden, daß man durch jeden Atommodellschwerpunkt jedes der in der Überschrift genannten Symmetrieelemente legen kann. In der Abb. 16 ist ein kleines Stück des Diamantraumgitters im Grund-, Auf- und Seitenriß dargestellt, d. h. projiziert auf (001), (100) und (010). Die Konstruktion des Auf- und Seitenrisses aus dem Grundriß ist sehr einfach. Die Bezifferung und die Koordinaten der Projektion jedes Kohlenstoffatoms ergeben sich ja aus seinem Symbol. So muß z. B. die Projektion des Atoms [3; 1; 3] im Aufriß an der Stelle $y=1$, $z=3$ stehen und die Bezifferung $x=3$ erhalten. Hat man in dieser Weise in einem solchen Riß nur die Projektionen und Bezifferungen der beiden Atome [0; 0; 0] und [1; 1; 1] ermittelt, so kann man den ganzen übrigen Riß in beliebiger Ausdehnung ganz mechanisch und ohne schwierige Überlegungen hinzeichnen. Aus Abb. 16 ersieht man, daß bei der hier gewählten Stellung des Aufrisses zum Grund- und Seitenriß die beiden letzteren, sofern man von den Koordinatenachsen absieht, durch Parallelverschiebung miteinander zur Deckung gebracht werden können, und mit dem Aufriß durch Drehung um 90^0 in der Ebene des Papiers. Man kann also alle Untersuchungen, zu denen der Grund-, Auf- und Seitenriß erforderlich ist, am Grundriß allein ausführen. Legt man z. B. in Abb. 4 durch die Projektion des Schwerpunktes irgendeines Atommodells je eine Gerade parallel zu S_1 und S_2 und denkt sich durch jede dieser Geraden senkrecht zur Ebene des Papiers je eine Ebene gelegt, so sind diese Ebenen Symmetrieebenen des Raumgitters. Sie liegen parallel zu (110) und ($1\bar{1}0$), falls hier die Abb. 4 nur als Grundriß betrachtet wird. Da aber nach der oben mitgeteilten Überlegung diese Abbildung auch als Auf- und Seitenriß betrachtet werden darf, so folgt, daß jede durch einen Atomschwerpunkt parallel zu jeder beliebigen Rhombendodekaëderfläche gelegte Ebene eine Symmetrieebene des ganzen Raumgitters ist.

In derselben Weise erkennt man bei der Betrachtung der Abb. 4, daß man durch jeden Atomschwerpunkt parallel zu jeder Würfelkante eine vierzählige Drehspiegelachse legen kann. Liegen auf einer solchen Achse, die beispielsweise senkrecht auf (001) stehen möge, die Atom-

[1]) Vgl. hierzu P. P. Ewald, Ann. der Phys. [4] 44, 277 [1914]; V. M. Goldschmidt, Kristiania Vidensk. Forhandlinger 1915, Nr. 3, S. 19; A. Johnsen, Jahrbuch der Radioaktivität und Elektronik, Band XIV, Heft 1 [1917], S. 109. Die ausführlichsten Angaben findet man bei P. Niggli, Geometrische Krystallographie des Diskontinuums, II, S. 395 [1919].

schwerpunkte in den Niveaus $z=(4n+p)d$, wo n der Reihe nach alle positiven und negativen ganzen Zahlen bzw. Null bedeutet und p eine der vier Zahlen 0, 1, 2 oder 3, so liegen die zugehörigen Drehspiegelebenen in den Niveaus $z=(4n+p)d$ und $z=(4n+p+2)d$, zwei Ausdrücke, die man in den einen $z=(2n+p)d$ zusammenziehen kann. Die Atomschwerpunkte folgen also einander auf der Achse in Abständen von $4d$, die Drehspiegelebenen dagegen in solchen von $2d$. Man kann dies z. B. an Abb. 17 erkennen, in der die Atommodelle, die einem Elementarwürfel angehören, durch kleine Tetraëder dargestellt sind. Die Umrisse der der II. Raumgitterkomponente angehörenden Tetraëder sind hier gestrichelt. Der in der Mitte des Elementarwürfels liegende Punkt M und die auf den Elementarwürfelkanten durch kleine Kreise markierten Punkte sind natürlich keine Atomschwerpunkte. Hier ist außer der oberen und unteren Würfelfläche auch die durch die Würfelmitte $M=[2;\ 2;\ 2]$ gelegte Horizontalebene eine Drehspiegelebene der durch die Atomschwerpunkte [2; 2; 0] und [2; 2; 4] gelegten Achse; denn nur so kann man auch diese beiden Atome miteinander überdecken. Zum Nachweis der Überdeckbarkeit des ganzen, unbegrenzten Raumgitters mit sich selbst durch Drehspiegelung, zerlegt man das Raumgitter in passend gewählte Teile und führt mit diesen nacheinander die Drehspiegelung aus. Dreht man in Abb. 4 z. B. die Atommodelle $[\bar{2};\ 0;\ 2]$, [2; 0; 2]; [6; 0; 2] usw. um eine in [0; 0; 0] senkrecht auf der Bildebene stehende Achse um 90° gegen den Uhrzeigersinn, so kommen die Schwerpunkte der genannten Atommodelle an die Stellen $[0;\ \bar{2};\ 2]$; [0; 2; 2]; [0; 6; 2] usw. Die Modelle haben dann aber eine solche Stellung, daß sie erst durch Spiegelung an einer im Niveau $z=+2d$ liegenden Ebene mit den an den Stellen $[0,\ \bar{2};\ 2]$; [0; 2; 2]; [0; 6; 2] usw. in Abb. 4 eingezeichneten Atommodellen zur Deckung kommen. Spiegelung an einer im Niveau $z=+4d$ liegenden Spiegelebene führt zur Überdeckung mit $[0;\ \bar{2};\ 6]$; [0; 2; 6]; [0; 6; 6] usw.

Auch die dreizähligen Achsen gehen durch die Schwerpunkte der Atommodelle (s. z. B. den Mittelpunkt des mittelsten, mit 12 bezeichneten Tetraëders in der Abb. 11, ferner A_1, A_2, A_3, B_1, B_2 und B_3 in Abb. 12). Im Gegensatz zu den trigonalen Achsen der hexakistetraëdrischen Klasse sind sie aber n i c h t polar[1]). Der Grund liegt darin, daß im Diamantraumgitter auf jeder dreizähligen Achse dicht neben jedem Atommodell der einen Komponente ein invers stehendes der anderen Komponente steht (vgl. Abb. 11 und 12). Wenn hier von den Symmetrieelementen der hexakistetraëdrischen Klasse die Rede ist, so sollen unter den trigonalen Achsen immer bipolare verstanden werden. Diese auf den ersten Blick unzulässig erscheinende Bezeichnungsweise ist unter Berücksichtigung folgender Betrachtung hier doch wohl am Platze. Faßt man z. B. in Abb. 17 zunächst nur eine der beiden, aus hexakistetraëdrischen Atommodellen aufgebauten Raumgitterkomponenten ins Auge, so sieht man, daß jeder Atomschwerpunkt ein Schnittpunkt aller Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse in des Wortes strengster Bedeutung ist. Stellt man nun die beiden Komponenten mit ihren Symmetrieelementen so ineinander, wie es der Bau des Diamantraumgitters fordert (vgl. Abb. 17), dann kommen die Symmetrieebenen völlig zur gegenseitigen Deckung, die trigonalen Achsen jedoch nur hinsichtlich ihrer Lage, aber nicht hinsichtlich ihres Richtungssinnes. Jede bipolare, trigonale Achse des Diamantraumgitters kann man also als ein Paar paralleler, polarer Achsen von entgegengesetztem Richtungssinn auffassen, deren gegenseitiger Abstand (senkrecht zur Achsenrichtung gemessen) Null ist.

Die im Diamantraumgitter vorhandenen dreizähligen Achsen der einfachen Symmetrie sind zugleich sechszählige Drehspiegelachsen. Das kann hier zunächst unberücksichtigt bleiben[2]),

[1]) Nach Versuchen von A. L. W. E. van der Veen ist der Diamant in der Richtung der dreizähligen Achsen weder piëzo- noch pyroëlektrisch; Zeitschr. für Krystallographie und Mineralogie **51**, 545 [1912].

[2]) Näheres hierüber s. S. 12 ff.

da die zugehörigen Drehspiegelebenen keinen einzigen Atomschwerpunkt enthalten, und hier zunächst nur diejenigen Symmetrieelemente betrachtet werden sollen, die durch die Atomschwerpunkte gehen.

Es wurde schon auf S. 8 darauf hingewiesen, daß im Diamantraumgitter durch jeden Atomschwerpunkt alle Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse gelegt werden können. Es ist nun noch nötig nachzuweisen, daß dasselbe für alle diejenigen Punkte gilt, die von den Atomschwerpunkten in der Richtung einer Würfelkante um $2d$, d. i. um die Hälfte der Länge einer Elementarwürfelkante entfernt liegen. In der Abb. 17 sind einige dieser Punkte durch kleine Kreise angedeutet. Auf S. 9 wurde bereits erwähnt, daß die durch die Atomschwerpunkte [2; 2; 0] und [2; 2; 4] gelegte, vierzählige Drehspiegelachse im Punkte M = [2; 2; 2] von einer zugehörigen horizontalen Drehspiegelebene geschnitten wird. Aber auch zwei vertikale Drehspiegelebenen parallel (100) und (010) und die zugehörigen horizontalen Drehspiegelachsen gehen durch den Punkt [2; 2; 2]. Durch [2; 2; 2] gehen ferner sechs, den Rhombendodekaëderflächen parallele Symmetrieebenen. Auch vier dreizählige, polare Drehungsachsen gehen von den in den Würfelecken liegenden Atommodellen aus durch den Punkt *M*. Da auf diesen dreizähligen Achsen auch die vier in Abb. 17 gestrichelt eingezeichneten Tetraëder der II. Raumgitterkomponente liegen, so zeigen die durch den Punkt [2; 2; 2] gehenden trigonalen Achsen den auf S. 9 besprochenen bipolaren Charakter. Der Punkt [2; 2; 2] ist also hinsichtlich der Lage der bisher besprochenen Symmetrieelemente von einem Atomschwerpunkte nicht verschieden. Das gleiche gilt natürlich von den übrigen 12, in der Abb. 17 durch Kreise markierten Punkten, denn jeder derselben kann durch passende Parallelverschiebung des Würfelumrisses gegen das ruhend gedachte System der Atomschwerpunkte zum Mittelpunkt eines Elementarwürfels gemacht werden. Natürlich kann man den Würfelumriß durch Parallelverschiebung auch so stellen, daß seine Ecken mit Atomschwerpunkten der II. Raumgitterkomponente zusammenfallen. Auch in dieser Stellung sind die Halbierungspunkte der Würfelkanten und der Würfelmittelpunkt Schnittpunkte aller Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse.

Alle Punkte, in denen sich sämtliche Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse schneiden, sollen künftig *H*-Punkte genannt werden[1].

Die *H*-Punkte des Diamantraumgitters sind in dem Grundriß Abb. 18 teils durch je zwei kleine konzentrische Kreise, teils durch Kreise mit konzentrischem Punkt bezeichnet[2]. Die erste Signatur bedeutet $z = 2nd$, die zweite $z = (2n + 1)d$, wo n jede beliebige, positive oder negative ganze Zahl oder Null bedeutet. Die *H*-Punkte bilden, wie man sieht, ein kubisches, raumzentriertes Punktgitter, dessen Elementarwürfel die Kantenlänge $2d$ hat. Der Grundriß eines solchen Elementarwürfels ist gestrichelt eingezeichnet. Die Punktdichte der *H*-Punkte ist doppelt so groß, wie die der Atomschwerpunkte; denn man erhält die nicht in den Atomschwerpunkten liegenden *H*-Punkte durch Verschiebung der Atomschwerpunkte um $2d$ in der Richtung einer Würfelkante.

Jede Symmetrieoperation der hexakistetraëdrischen Klasse bringt jedes Atommodell entweder mit sich selbst oder mit einem anderen Atommodell derselben Raumgitterkomponente zur Deckung (s. dagegen S. 13).

[1]) In Abb. 12 sind alle in der Ebene des Papiers liegenden *H*-Punkte mit *H* bezeichnet.

[2]) In der Abb. 18 ist die Lage des Koordinatensystems zu den hier nicht eingezeichneten Atomschwerpunkten dieselbe wie in den Abb. 1, 2 und 4; das soll heißen, daß z. B. in den Punkten [0; 0; 0] und [1; 1; 1] je ein Atomschwerpunkt liegt. In Abb. 18 bedeutet ferner ein kleiner Kreis (ohne konzentrischen Punkt) und ein Punkt (ohne konzentrischen Kreis) ein Symmetriezentrum; vgl. S. 12.

Lage der Symmetriezentren im Diamantraumgitter.

Die Lage der einen Hälfte aller im Diamantraumgitter vorkommenden Symmetriezentren ist dadurch definiert, daß die Verbindungslinie der Schwerpunkte zweier nächst benachbarter Atommodelle durch ein Symmetriezentrum halbiert wird[1]). Verwendet man als Atommodelle die auf S. 4 beschriebenen VAN 'T HOFFsche Tetraëder, so liegt ein Symmetriezentrum überall dort, wo zwei Tetraëder sich berühren. Außer diesen Symmetriezentren gibt es im Diamantraumgitter noch ebensoviele an bestimmten anderen Stellen, die man erhält, wenn man die soeben erwähnten Symmetriezentren in der Richtung einer Würfelkante um $2d$, also um die Hälfte der Länge der Elementarwürfelkante verschiebt[2]). In der Abb. 20, die eine Projektion auf eine Würfelfläche darstellt, sei I_1 ein Symmetriezentrum, das in der Mitte zwischen den Schwerpunkten der beiden nächst benachbarten Atommodelle P und Q liegt; A sei ein beliebiges, anderes Atommodell und B das hinsichtlich I_1 invers zu A gelegene Atommodell. Natürlich ist I_1 auch das Symmetriezentrum der Atommodelle C und D. Die Modelle C und A bzw. B und D sollen paarweis im gleichen Niveau, d. h. im gleichen Abstande von der Projektionsebene liegen. Nun kann man aber auch C als das Produkt einer Inversion von B, und D als das Produkt einer Inversion von A betrachten. Die zwei neuen, hierzu notwendigen Symmetriezentren sind I_2 und I_3. Die Abb. 20 zeigt, daß $\overline{I_2 I_1} = \overline{I_1 I_3} = 2d$ ist. I_2 und I_3 können nicht in der Mitte zwischen je zwei nächstbenachbarten Atomschwerpunkten liegen, denn Punkte solcher Art müssen von I_1 in der Richtung einer Würfelkante mindestens um $4d$ entfernt sein. I_2 und I_3 müssen also im Diamantraumgitter eine andere Lage haben, als I_1. Man kann sie als Cyclohexanringmittelpunkte auffassen. In der Abb. 4 ist der Punkt $[\frac{5}{2}; \frac{7}{2}; \frac{11}{2}]$ (d. i. der Punkt I_{24} der Abb. 21) ein Symmetriezentrum der oben zuerst besprochenen Art, denn er liegt in der Mitte zwischen den Schwerpunkten [2; 4; 6] und [3; 3; 5] zweier nächstbenachbarter Atommodelle. Im Abstande $2d$ unter diesem Symmetriezentrum liegt ein anderes $[\frac{5}{2}; \frac{7}{2}; \frac{7}{2}]$. d. i. I_{14} in Abb. 21, welches der Mittelpunkt desjenigen Cyclohexanrings ist, dem die Atommodelle [2; 4; 2], [3; 5; 3], [4; 4; 4], [3; 3; 5], [2; 2; 4] und [1; 3; 3] angehören; vgl. hierzu Abb. 1, 22 und S. 12. Je zwei, in diesem Atomring einander diametral gegenüberstehende Atommodelle stehen invers zueinander hinsichtlich des Symmetriezentrums $[\frac{5}{2}; \frac{7}{2}; \frac{7}{2}]$, was man durch Bildung des arithmetischen Mittels der betr. Atomsymbole kontrollieren kann.

Alle im Diamantraumgitter vorkommenden Symmetriezentren sollen künftig I-Punkte genannt werden[3]).

Um jeden Elementarwürfelmittelpunkt herum, z. B. um den Punkt [3; 3; 3] der Abb. 21, der ja nach S. 10 ein H-Punkt ist, sind je vier I-Punkte verteilt, wie die vier Tetraëderecken um den Tetraëderschwerpunkt, im vorliegenden Beispiele die vier Symmetriezentren I_{14}, I_{15}, I_{16}, und I_{17}; denn $\overline{I_4 I_{14}} = \overline{I_{14} I_{24}} = 2d$, und dasselbe gilt für die Lage von I_{15}, I_{16} und I_{17} zwischen I_5 und I_{25} usw. Alle vier (I_{14} bis I_{17}) sind Cyclohexanringmittelpunkte, wie man

[1]) Hieraus ergibt sich folgende Definition des Diamantraumgitters: man erhält ein Diamantraumgittermodell, wenn man hexakistetraëdrische Kohlenstoffatommodelle nach dem von der Stereochemie her bekannten Schema des zentrierten, regulären Tetraëders (s. Abb. 19) so zueinander stellt, daß jedes Atommodell invers zu jedem der vier nächstbenachbarten steht. Als Baustein des Diamantraumgitters und der Diamantkrystallmodelle kann man also das hexakistetraëdrische Kohlenstoffatommodell bezeichnen mit dem Zusatz, daß diese Bausteine nicht parallel, sondern invers aneinander gebaut werden müssen. Bei der Zwillingsbildung nach dem Spinellgesetze stehen die zu beiden Seiten und unmittelbar an der Zwillingsebene liegenden Bausteine spiegelbildlich zueinander (s. S. 31ff.).

[2]) PAUL NIGGLI, Geometrische Krystallographie des Diskontinuums, I. Teil, S. 78.

[3]) In Abb. 12 sind alle in der Ebene des Papiers liegenden I-Punkte mit I bezeichnet.

durch Vergleich der Abb. 4 und 21 erkennen kann. Die in der Abb. 21 gestrichelt gezeichneten Tetraëder sind natürlich keine Atommodelle, sondern sollen nur die Lage der zwischen den Atommodellen [3; 3; 5], [3; 3; 1], [2; 4; 6] und [2; 4; 2] befindlichen H- und I-Punkte verdeutlichen.

Abb. 22 zeigt in schiefer Projection einen aus 10 Kekuléschen Atommodellen bestehenden Ausschnitt aus dem Diamantraumgitter (vergl. auch Abb. 1); H ist ein Elementarwürfelmittelpunkt (entsprechend dem Punkte [3; 3; 3] in Abb. 21); I_{14} bis I_{17} sind die vier ihn umgebenden Symmetriezentren, deren Lage in den Mittelpunkten von vier Cyclohexanringen hier mit Lineal und Zirkel unmittelbar festgestellt werden kann. Die Symbole der 10 Kohlenstoffatommodelle stimmen mit der Bezeichnungsart der Abb. 4 überein. Dieser aus 10 Kohlenstoffatommodellen bestehende Komplex (Abb. 22) ist das Modell eines kleinen Diamantoktaëders (vergl. S. 21).

Die I-Punkte des Diamantraumgitters sind in Abb. 18 teils durch kleine Kreise, teils durch Punkte bezeichnet. Die Kreise liegen in den Niveaus $z = (2n + \frac{1}{2})\, d$, die Punkte in den Niveaus $z = (2n + \frac{3}{2})\, d$, wo n jede beliebige, positive oder negative, ganze Zahl oder Null bedeutet. Die I-Punkte bilden ein kubisches, flächenzentriertes Punktgitter, dessen Elementarwürfel die Kantenlänge $2\,d$ hat. Dieses Gitter ist gegen das der H-Punkte (vgl. S. 10) um $\frac{d}{2}\sqrt{3}$ verschoben und zwar in derselben Richtung, in welcher die zweite Raumgitterkomponente gegen die erste verschoben ist; das ist bei der hier überall gewählten Stellung des Diamantraumgitters zum Koordinatensystem die Verschiebung $[0; 0; 0] \rightarrow [\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{1}{2}]$. Der Grundriß eines Elementarwürfels des I-Punktgitters ist in der Abb. 18 strichpunktiert eingezeichnet. Im Diamantraumgitter ist die Punktdichte der I-Punkte viermal so groß wie die der Atomschwerpunkte, und zweimal so groß wie die der H-Punkte.

Kombination der Symmetrieelemente der hexakistetraëdrischen Klasse mit den Symmetriezentren.

Mit den vierzähligen Drehspiegelachsen können die Symmetriezentren nicht kombiniert werden, da auf keiner dieser Achsen ein Zentrum liegt. Dagegen erzeugt die Kombination der Zentren mit den parallel zu den Rhombendodekaëderflächen liegenden Symmetrieebenen neue Symmetrieachsen. Abb. 23 zeigt zwei durch Kekulé'sche Modelle dargestellte Kohlenstoffatome des Diamantraumgitters. Die Gerade $C_1\, C_2$ ist in ihrer Eigenschaft als Würfeldiagonale die Schnittlinie dreier Symmetrieebenen, die parallel zu Rhombendodekaëderflächen liegen; die eine enthält außer $C_1\, C_2$ auch noch die Punkte A und F, die zweite die Punkte B und G und die dritte die Punkte D und H. Da nun in E ein Symmetriezentrum liegt, steht in E auf jeder der drei soeben genannten Symmetrieebenen eine zweizählige Achse senkrecht (Z_1, Z_2 und Z_3). $C_1\, C_2$ ist ferner eine bipolare, dreizählige Achse; durch Kombination mit dem in E liegenden Symmetriezentrum wird sie zu einer sechszähligen Drehspiegelachse, die eine ihrer Drehspiegelebenen in E schneidet. In der Abb. 12 sind alle in der Ebene des Papiers liegenden sechszähligen Drehspiegelachsen (A_1, A_2, A_3, B_1, B_2 und B_3) und die auf ihnen liegenden I-Punkte (mit I bezeichnet) eingetragen. Auf jeder sechszähligen Drehspiegelachse liegen in Abständen von $6\,h = 2\,d\sqrt{3}$ I-Punkte, welche abwechselnd Cyclohexanringmittelpunkte und solche Symmetriezentren sind, die in der Mitte zwischen den Schwerpunkten zweier nächstbenachbarter Atommodelle liegen. Jeder dieser I-Punkte ist der Durchstoßpunkt der betreffenden sechszähligen Drehspiegelachse durch eine zugehörige Drehspiegelebene. Die Analogie in der Lage der H- bzw. I-Punkte und damit der Drehspiegelebenen auf den vier- bzw. sechszähligen Drehspiegelachsen ist leicht erkennbar (vgl. S. 9).

Der Komplex von Symmetrieelementen, deren gemeinsamer Schnittpunkt E ist (Abb. 23), umfaßt also eine bipolare, sechszählige Drehspiegelachse mit der zugehörigen Drehspiegelebene, drei in dieser Achse sich schneidende, gleichwertige Symmetrieebenen und senkrecht auf jeder dieser Ebenen eine zweizählige Achse; das ergibt die ditrigonal-skalenoëdrische Symmetrie.

Nun muß noch nachgewiesen werden, daß auch die Cyclohexanringmittelpunkte Schnittpunkte der Symmetrieelemente der ditrigonal-skalenoëdrischen Klasse sind. Abb. 22 zeigt vier Cyclohexanringmittelpunkte (I-Punkte) um einen H-Punkt (Elementarwürfelmittelpunkt) gruppiert (vgl. S. 12). In dem H-Punkte schneiden sich vier bipolare, dreizählige Achsen (vgl. S. 10) derart, daß auf jeder derselben einer jener vier Cyclohexanringmittelpunkte liegt. Nun ist jeder Cyclohexanringmittelpunkt ein Symmetriezentrum (vgl. S. 11) und jede der dreizähligen Achsen die Schnittlinie dreier Symmetrieebenen, die Rhombendodekaëderflächen parallel sind. Hieraus folgt, daß auch in jedem Cyclohexanringmittelpunkt sich dieselben Symmetrieachsen und -ebenen schneiden, wie in dem Punkte E der Abb. 23, d. h. wie in einem solchen Symmetriezentrum, das in der Mitte zwischen den Schwerpunkten zweier nächstbenachbarter Atommodelle liegt.

Alle I-Punkte sind also Schnittpunkte aller Symmetrieelemente der ditrigonal-skalenoëdrischen Klasse.

Von den hier besprochenen Symmetrieelementen haben das Symmetriezentrum, ferner die zweizähligen, senkrecht auf den Rhombendodekaëderflächen stehenden Achsen und die sechszähligen, senkrecht auf den Oktaëderflächen stehenden Drehspiegelungsachsen deswegen, weil sie ein Symmetriezentrum enthalten, die Eigenschaft, daß sie unter allen Umständen jedes beliebige Atommodell der einen Komponente immer mit einem Atommodell der anderen Komponente überdecken (vgl. hingegen S. 10).

4. Abschnitt.

Symmetrie begrenzter Diamantraumgitterausschnitte.

Ein nicht zu großer, allseitig begrenzter Diamantraumgitterausschnitt kann nicht alle Symmetrieelemente aufweisen, die im unbegrenzten Raumgitter vorhanden sind. Es ist z. B. ausgeschlossen, daß im begrenzten Raumgitterausschnitt neben den drei vierzähligen, senkrecht auf den Würfelflächen stehenden Drehspiegelachsen in aller Strenge auch noch eine oder mehrere sechszählige Drehspiegelachsen senkrecht zu den Oktaëderflächen vorkommen. Ganz abgesehen von allen übrigen Argumenten beweist dies im vorliegenden Falle folgende, recht einfache Überlegung. Geht man z. B. bei einem möglichst oktaëderähnlichen Diamantraumgitterausschnitte (Abb. 24) von der Ecke A durch wiederholte Drehspiegelung mittels der sechszähligen Achse S zur Ecke D, so muß das Atommodell bei D der zweiten Raumgitterkomponente angehören, wenn das bei A der ersten angehörte (vergl. oben). Legt man andererseits durch B und E eine vierzählige Drehspiegelachse V und überdeckt durch wiederholte Drehspiegelung (oder durch einfache Drehung um BE um 180^{0}) A mit D, so müssen die Atommodelle an den Ecken A und D derselben Raumgitterkomponente angehören (vergl. S. 10). Da diese Folgerungen einander widersprechen, sind die vier- und die sechszähligen Drehspiegelachsen im begrenzten Diamantraumgitterausschnitt miteinander unvereinbar. Hexakistetraëdrische Symmetrie und hiervon örtlich getrennte Symmetriezentren, die im unbegrenzten Raumgitter nebeneinander existieren, ja sich sogar teilweise kombinieren können, schließen sich gegenseitig in kleinen Diamantraumgitterausschnitten

aus. Der Mittelpunkt eines gesetzmäßig begrenzten Raumgitterausschnittes, d. h. eines solchen, der einem vollkommenen Diamantkrystall möglichst ähnlich ist, kann also entweder nur ein H-Punkt oder nur ein I-Punkt sein; im ersten Falle zeigt der Raumgitterausschnitt natürlich hexakistetraëdrische Symmetrie mit jenen Einschränkungen, die durch die Bipolarität der trigonalen Achsen gegeben sind (vgl. S. 9), im zweiten Falle ditrigonal-skalenoëdrische Symmetrie (vergl. 6. Abschnitt).

5. Abschnitt.

Raumzellmodelle.

Ludwig Föppl [1]) hat gezeigt, daß der natürliche Fundamentalbereich des Kohlenstoffatoms im Diamantraumgitter eine Kombination von Tetraëder und Rhombendodekaëder ist. Statt der etwas schleppenden Bezeichnung „natürlicher Fundamentalbereich" sollen hier die kürzeren Namen Raumzelle (abgekürzt aus Raumgitterzelle) oder Zellmodell benutzt werden. Ein Blick auf das in Abb. 25 dargestellte Raumgitterstück zeigt, daß die Zentraldistanz der Tetraëderflächen des Zellmodells gleich $\frac{d}{2}\sqrt{3}$ sein muß; denn es ist z. B. der Abstand der Atomschwerpunkte [0; 0; 0] und [1; 1; 1] gleich $d\sqrt{3}$. Ferner ist der Abstand zwischen [0; 0; 0] und [2; 2; 0] oder [0; 2; 2] usw. gleich $2d\sqrt{2}$. Folglich ist die Zentraldistanz der rhombendodekaëdrischen Flächen des Zellmodells gleich $d\sqrt{2}$. Aus diesen beiden Zentraldistanzen ergibt sich die Gestalt des Zellmodells auf Grund folgender Überlegung. Abb. 26 zeigt dasselbe umgeben von einem Würfel. Abb. 27 ist der durch die Würfelecken A, C, G und E gelegte Rhombendodekaëderschnitt. Die beiden räumlichen Würfeldiagonalen AG und CE schneiden sich in M, dem Schwerpunkte des Würfels und des Zellmodells. $\overline{AI}$ ist die Höhe des Tetraëders $ACFH$. Da $\overline{IM}$, die Zentraldistanz der tetraëdrischen Fläche, gleich $\frac{d}{2}\sqrt{3}$ sein soll, muß $\overline{MA} = \frac{3}{2}d\sqrt{3}$, demnach $\overline{AG} = 3d\sqrt{3}$, also $\overline{AE}$, die Kantenlänge des Würfels $ABCDEFGH$, gleich $3d$ sein.

Die beiden Rhombendodekaëderflächen des Zellmodells, die senkrecht auf der Ebene $ACGE$ stehen, schneiden diese Ebene in den Geraden LN und OP. Da die Zentraldistanzen $\overline{QL}$ und $\overline{QO}$ dieser Flächen gleich $d\sqrt{2}$ sein sollen, da ferner $\overline{RC} = \frac{3}{2}d\sqrt{2}$ ist, ist $\overline{CL} = \frac{1}{3}\overline{CS}$ und $\overline{AO} = \frac{1}{3}\overline{AS}$, also auch in Abb. 26 $\overline{CT} = \frac{1}{3}\overline{CH}$. Die Rhombendodekaëderflächen lassen also von jeder Kante des Tetraëders $ACFH$ nur das mittlere Drittel übrig. Die Tetraëderflächen des Zellmodells sind demnach reguläre Sechsecke von der Seitenlänge $\overline{UV} = d\sqrt{2}$. Die Abb. 29 und 30 zeigen das van 't Hoffsche Kohlenstofftetraëder und das Zellmodell, beide in gleichem Maßstabe und in derselben krystallographischen Orientierung auf dieselbe Würfelfläche projiziert.

Der Schwerpunkt S der Raumzelle (Abb. 32) ist die Ruhelage des Schwerpunktes des zugehörigen Kohlenstoffatoms, ist also ein H-Punkt. Die Mittelpunkte I_1, I_2, I_3 und I_4 der vier sechseckigen Flächen sind die Eckpunkte des zugehörigen, gestrichelt eingezeichneten van 't Hoffschen Atommodells. Sie sind also die vier dem Atomschwerpunkte nächst benachbarten Symmetriezentren (I-Punkte). Zeichnet man unter Benutzung der Abb. 29 und 30 um die drei nach Art der Abb. 16 gezeichneten Projektionen eines van 't Hoffschen Kohlenstofftetraëders die Projektionen des zugehörigen Zellmodells, so sieht man, daß die

[1]) Phys. Zeitschrift **15**, 191 [1914].

vier dreikantigen Ecken des Zellmodells (R_1, R_2, R_3 und R_4 in Abb. 32) mit solchen H-Punkten zusammenfallen, die nicht Atomschwerpunkte, sondern Elementarwürfelmittelpunkte sind. Bringt man z. B. den Schwerpunkt S des Zellmodells der Abb. 32 mit dem Atomschwerpunkt [2; 4; 2] der Abb. 21 zur Deckung, so fällt der Punkt R_1 der Abb. 32 mit dem H-Punkte [3; 3; 3] der Abb. 21 zusammen und die Punkte I_1, I_2, I_3, I_4, I_{11}, I_{14}, I_{16} und I_{17} der Abb. 32 mit den gleich bezeichneten Punkten der Abb. 21. Alle vierkantigen Ecken sind Symmetriezentren (Cyclohexanringmittelpunkte). Die vier sechseckigen Flächen des Zellmodells sind Teile von Drehspiegelebenen, die senkrecht auf sechszähligen Drehspiegelachsen stehen. Die zwölf dreieckigen Flächen sind Stücke von Symmetrieebenen, die Rhombendodekaëderflächen parallel liegen und nach S. 10 durch H-Punkte, hier also durch die Punkte R_1, R_2, R_3 oder R_4 gehen. Die zwölf kurzen Kanten, von denen je drei von jedem der vier Punkte R_1, R_2, R_3 oder R_4 ausgehen, sind Stücke dreizähliger Achsen der einfachen oder sechszähliger Achsen der zusammengesetzten Symmetrie. Die achtzehn übrigen Kanten (von der Länge $d\sqrt{2}$) sind Stücke von zweizähligen Schraubenachsen, deren Translation gleich $d\sqrt{2}$ ist.

Zwei nächst benachbarte Zellmodelle — das sind also solche, die den beiden verschiedenen Raumgitterkomponenten angehören — berühren sich mit Tetraëderflächen und stehen invers zueinander. Denn der Mittelpunkt der Berührungsfläche ist ja ein Symmetriezentrum. Zwei Zellmodelle, die sich mit Rhombendodekaëderflächen berühren, gehören derselben Raumgitterkomponente an; denn sie stehen parallel zueinander, da die Berührungsfläche eine Ebene der einfachen Symmetrie ist.

Denkt man sich in Abb. 25 die gestrichelten Teile und die vier Ziffern 3, 3, $\bar{3}$ und $\bar{3}$ hinweg, so bleibt der Grundriß der 16 Atome übrig (dargestellt durch van 't Hoffsche Tetraëder), deren Raumzellen die des Atoms [0; 0; 0] teils mit tetraëdrischen, teils mit rhombendodekaëdrischen Flächen berühren.

Damit ist die Zahl der Zellmodelle, die das Zellmodell [0; 0; 0] berühren, noch nicht erschöpft. Es gibt nämlich noch 12 Zellmodelle, deren jedes nur mit einer vierkantigen Ecke eine der 12 vierkantigen Ecken des Zellmodells [0; 0; 0] berührt. Dies und alles übrige, was damit zusammenhängt, wie z. B. Abstand und Stellung der berührenden Zellmodelle, ergibt sich am einfachsten aus der Tatsache, daß jede vierkantige Zellmodellecke mit einem I-Punkte des Diamantraumgitters zusammenfällt. Zeichnet man in Abb. 25 den Grundriß (Abb. 30) des Zellmodells [0; 0; 0] ein, und verlängert die Verbindungslinien des Zellmodellschwerpunktes mit den vierkantigen Ecken um ihre eigene Länge, so trifft man auf die Schwerpunkte der soeben erwähnten 12, invers zu [0; 0; 0] stehenden Atome, von denen 8 in Abb. 25 durch gestrichelte Grundrisse van 't Hoffscher Tetraëder dargestellt sind. Die Projektionen der übrigen vier liegen in dieser Abbildung näher bei der Projektion von [0; 0; 0]; es sind die Atomschwerpunkte [$\bar{1}$; $\bar{1}$; $\bar{3}$], [$\bar{1}$; 1; 3], [1; $\bar{1}$; 3] und [1; 1; $\bar{3}$].

Abb. 25 zeigt, daß in allen diesen 12 Fällen das Zellmodell [0; 0; 0] und das von diesem nur mit einer vierkantigen Ecke berührte einem Cyclohexanring angehören und zwar (nach chemischer Ausdrucksweise) in 1,4-Stellung[1]). Der Berührungspunkt der beiden Zellmodelle ist der Mittelpunkt des Cyclohexanrings. Die beiden Zellmodelle stehen natürlich invers zueinander hinsichtlich ihres Berührungspunktes. Da dieser Inversionspunkt aber auch der Schnittpunkt einer Ebene und einer sechszähligen Achse der zusammengesetzten Symmetrie ist, stoßen alle sechs Zellmodelle dieses und jedes anderen Cyclohexanrings in ihrem Ringmittelpunkt mit je einer vierkantigen Ecke zusammen. Faßt man in Abb. 25 z. B. den Cyclo-

[1]) Jedes Kohlenstoffatom des nicht verzwillingten Diamanten gehört nämlich 12 Cyclohexanringen an.

hexanring ins Auge, der aus den sechs Atomen [0; 0; 0], [1; 1; 1], [2; 2; 0], [3; 1; $\bar{1}$], [2; 0; $\bar{2}$] und [1; $\bar{1}$; $\bar{1}$] besteht, so berührt die Raumzelle [0; 0; 0] die beiden nächsten Nachbarn [1; 1; 1] und [1; $\bar{1}$; $\bar{1}$] mit je einer tetraëdrischen Fläche, die beiden etwas entfernteren Raumzellen [2; 2; 0] und [2; 0; $\bar{2}$] mit je einer Rhombendodekaëderfläche und die fernststehende Raumzelle [3; 1; $\bar{1}$] nur mit einer vierkantigen Ecke und zwar mit derjenigen, in der die beiden eben erwähnten tetraëdrischen und die beiden rhombendodekaëdrischen Flächen der Raumzelle [0; 0; 0] zusammenstoßen. Jede vierkantige Ecke berührt also 5 andere vierkantige Ecken.

Zellmodelle solcher Atome, die vom Atom [0; 0; 0] weiter entfernt sind, als die in Abb. 25 dargestellten, können infolge zu großen Abstandes das Zellmodell [0; 0; 0] nicht berühren.

In jedem *H*-Punkt, der kein Atomschwerpunkt ist, stoßen vier Zellmodelle derart zusammen, daß eine dreikantige Rhombendodekaëderecke jedes dieser vier Zellmodelle mit diesem *H*-Punkt zusammenfällt. Jedes dieser vier Zellmodelle berührt jedes der drei anderen mit einer Rhombendodekaëderfläche. Eine solche Gruppe bilden z. B. die Raumzellen der vier Atome [1; 1; 1], [$\bar{1}$; $\bar{1}$; 1], [1; $\bar{1}$; 3] und [$\bar{1}$; 1; 3]. Der *H*-Punkt, in dem sie zusammenstoßen, ist der Punkt [0; 0; 2]. In Abb. 17 stoßen im Punkte $M = [2; 2; 2]$ die vier Zellmodelle mit u n geradzahligem Symbol zusammen, in Abb. 22 im Punkte $H = [3; 3; 3]$ die vier Zellmodelle mit g e r a d zahligem Symbol.

Berühren sich zwei Zellmodelle mit je einer tetraëdrischen Fläche, so bedeutet das, daß die beiden zugehörigen Atome durch eine Valenz spannungsfrei miteinander verbunden sind. Die Frage liegt nahe, ob die beiden anderen Arten der gegenseitigen Berührung zweier Zellmodelle, nämlich die Berührung mit rhombendodekaëdrischen Flächen oder mit vierkantigen Ecken, vielleicht die Bindung der Atome durch eine Partial- oder Nebenvalenz oder etwas Ähnliches bedeutet. Es wurde oben gezeigt, daß im Diamantraumgitter Berührungen dieser Art zwischen denjenigen Zellmodellen vorkommen, die in einem Cyclohexanring in 1,3- oder in 1,4-Stellung stehen. Nun enthalten sehr viele Cyclohexanderivate der organischen Chemie sechsgliedrige Kohlenstoffatomringe, die höchstwahrscheinlich dieselbe oder eine sehr ähnliche Form haben oder von selbst annehmen können, welche die sechsgliedrigen Ringe des Diamantraumgitters dauernd aufweisen[1]). Aber gerade bei diesen Substanzen ist bisher noch keine einzige Beobachtung gemacht, die Anlaß zu der Annahme gegeben hätte, daß Ringkohlenstoffatome in 1,3- oder 1,4-Stellung durch Partialvalenzen oder etwas Ähnliches verknüpft seien.

Jedem Kenner der verschiedenen Theorien und Formeln des Benzolkerns drängt sich hier ein Vergleich der Benzolformeln mit dem aus Zellmodellen aufgebauten Cyclohexanring auf. Es ist aber vor der Hand ganz unmöglich, auf diesem Wege eine Brücke zwischen der Benzoltheorie und der Lehre vom Diamantraumgitter zu schlagen, weil nach dem heutigen Stand unserer Kenntnisse die sechsgliedrigen Ringe im Diamant und im Benzol grundverschieden voneinander sind.

Das Zellmodell ist nicht ein Modell des Kohlenstoffatoms schlechthin, sondern ein Modell, das außer dem Kohlenstoffatom auch noch den mittleren Spielraum umfaßt, der dem Atom bei Zimmertemperatur im nicht verzwillingten Diamant zur Verfügung steht. An Stelle von Kohlenstoffatommodellen darf also das Zellmodell, streng genommen, zunächst nur beim Aufbau von nicht verzwillingten Raumgitterausschnitten und Diamantkrystallmodellen verwendet werden; betreffs der Einschränkung bei Zwillingsbildung s. S. 32. Die Eigenschaften des Diamanten machen es recht wahrscheinlich, daß der Spielraum der Atome hier verhältnismäßig recht klein ist. In den organisch-chemischen Stoffen ist der Schwerpunktsabstand

[1]) Eine Ausnahme ist z. B. der sechsgliedrige Ring im Molekül des Camphers.

solcher Kohlenstoffatome, die durch eine einfache Bindung miteinander verknüpft sind, vielleicht etwas größer als im Diamant. Hinreichend Genaues ist hierüber aber wohl noch nicht bekannt. Das „Zellmodell des einfach gebundenen Kohlenstoffatoms in den organisch-chemischen Stoffen“ ist also vielleicht etwas größer, als das des Diamantkohlenstoffs; in ihrer äußeren Form werden die beiden sich aber in vielen Fällen wahrscheinlich nur wenig voneinander unterscheiden. Man wird also in vielen Fällen und zwar in erster Linie bei Stoffen mit nur einfachen Bindungen zwischen den Kohlenstoffatomen das Diamantzellmodell als Atommodell verwenden können. Für manche Zwecke, z. B. für den Aufbau der vollkommen geschlossenen Cyclopentan-, -butan- und -propanringe, sind kleine Abweichungen von der hier beschriebenen Form des Diamantzellmodells, z. B. konvexe Wölbung der Valenzflächen oder Ähnliches, erwünscht. Hierdurch wird jedoch die Übereinstimmung dieser verschiedenen Modelle in ihren Hauptmerkmalen nicht allzusehr vermindert. Für die Zwecke der organischen Chemie sind solche Kohlenstoffatommodelle gelegentlich bereits vorgeschlagen worden.[1] Sie haben zweifellos manche beträchtliche Vorzüge vor den KEKULÉschen Atommodellen, da sie etwas über die Raumerfüllung des Atoms aussagen, hauptsächlich aber deswegen, weil sie ohne Annahme gerichteter Valenzen lediglich auf Grund einfacher Annahmen über die Form und Raumerfüllung des Kohlenstoffatoms Abstand und Lage der Kohlenstoffatomschwerpunkte im Molekül zutreffend zur Anschauung bringen. Auch für die BAEYERsche Spannungstheorie gewinnt man mit solchen Atommodellen eine anschauliche Vorstellung. Natürlich sind auch diese „Atommodelle“ der organischen Chemie im Grunde genommen Zellmodelle. Erst der genauere Einblick in die Vorgänge im Innern dieser, zunächst doch nur die Rolle eines Notbehelfs spielenden Polyeder kann das definitive Atommodell liefern.

Tetraëdrisch-rhombendodekaëdrische Zellmodelle aus Holz oder Pappe herzustellen, ist ziemlich zeitraubend und etwas schwierig. Größere Komplexe solcher Zellmodelle perspektivisch oder, richtiger ausgedrückt, in schiefer Projektion zu zeichnen, ist einigermaßen mühsam. Einer der Gründe hiervon ist die starke Verkürzung der Flächen $(01\bar{1})$ und $(0\bar{1}1)$ bei der üblichen Art der Darstellung. Alle diese Schwierigkeiten umgeht man durch Verwendung des in Abb. 28 dargestellten, zwar nur angenähert richtigen, aber viel bequemeren ditetraëdrischen Zellmodells. Dasselbe entsteht aus dem tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Modell dadurch, daß man die vier flachen, dreikantigen Pyramiden durch Tetraëderflächen abschneidet. Man kann es auffassen als die Kombination zweier Tetraëder, deren Zentraldistanzen (Abb. 27) $\overline{IM} = \frac{1}{2} d \sqrt{3}$ und $\overline{MW} = \frac{5}{6} d \sqrt{3}$ sich wie 3 : 5 verhalten. Es wird von je vier regulären Sechsecken und Dreiecken begrenzt; alle 18 Kanten sind gleichlang $(d \sqrt{2})$. Abb. 31 ist der Grundriß dieses ditetraëdrischen Zellmodells, in demselben Maßstabe und in derselben krystallographischen Orientierung auf dieselbe Würfelfläche projiziert wie das VAN 'T HOFFsche Kohlenstofftetraëder in Abb. 29 und das tetraëdrisch-rhombendodekaëdrische Zellmodell in Abb. 30. Da das Volumen des ditetraëdrischen Zellmodells etwas kleiner ist, als das des tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen, wird der Raum bei regelrechter Aneinanderlagerung ditetraëdrischer Zellmodelle (Sechseck auf Sechseck; jedes Zellmodell invers zu jedem seiner vier nächsten Nachbarn) nicht vollkommen erfüllt (Näheres s. S. 19). Dagegen stimmt die Lage der Schwerpunkte der Zellmodelle in solchen Zellmodellkomplexen vollkommen mit der Lage der Atomschwerpunkte im Diamantraumgitter überein. In den folgenden Abschnitten wird zu den Betrachtungen über die Morphologie des Diamanten fast ausschließlich das bequeme, ditetraëdrische Zellmodell verwendet und nur ausnahmsweise das streng richtige, tetraëdrisch-rhombendodekaëdrische.

[1] KNÖVENAGEL, Ann. d. Chem. **311**, 194 [1900], wo auch auf ältere Angaben hingewiesen wird.

6. Abschnitt.

Morphologie der aus Zellmodellen aufgebauten Diamantkrystallmodelle.

Will man die Abbildung eines Modells eines nur aus wenigen Atomen bestehenden Diamantkrystalls entwerfen, so erhält man ein in mancher Hinsicht unzulängliches Bild, wenn man nur die Atomschwerpunkte darstellt z. B. durch Kugeln, deren Durchmesser, wie bei den KEKULÉschen Atommodellen, klein ist im Vergleich mit dem Abstand der Schwerpunkte zweier nächstbenachbarter Atommodelle. Zur Darstellung eines sehr kleinen Krystalls genügt eben nicht die Abbildung der Lage der Atomschwerpunkte, sondern man muß auch die Raumerfüllung der an der Krystalloberfläche liegenden Atome erkennen können. Für diesen Zweck eignen sich die im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Zellmodelle gut da sie die Lage der Atomschwerpunkte richtig wiedergeben und eine anschauliche Vorstellung von der Raumerfüllung jedes einzelnen Atoms und von den Grenzen des jedem Atome im Diamant zur Verfügung stehenden Bereichs geben. Hierbei wird allerdings die noch unbewiesene Annahme gemacht, daß auch in der Krystalloberfläche selbst und in den nächsten, unmittelbar darunter liegenden Schichten die Abstände und Spielräume der Atome genau dieselben sind, wie im Innern eines großen Krystalls. Mit dieser Voraussetzung hängt wohl auch die Vorstellung von der Beschaffenheit der freien Valenzen an der Oberfläch der Diamantkrystalle in irgendeiner Weise zusammen.

Bei der Konstruktion der in den folgenden Abschnitten beschriebenen Diamantkrystallmodelle waren folgende zwei Gedanken maßgebend, die sich aus der Betrachtung des Diamantraumgitters ergeben. 1. Der Baustein der Diamantkrystalle ist das Kohlenstoff**atom**, und nicht etwa ein **Komplex** von Kohlenstoffatomen. 2. In jedem Diamantkrystall sind alle Kohlenstoffatome mit ihren nächsten Nachbarn durch Valenzen verbunden. Dieser zweite Satz bedarf einer kurzen Erläuterung. Der Versuch liegt nahe, den kleinsten theoretisch möglichen Diamantwürfel in der Weise zu konstruieren, daß man in dem durch Abb. 3 oder 17 dargestellten Elementarwürfel jeden Atomschwerpunkt bzw. jedes Tetraëder durch ein Zellmodell ersetzt. Gegen dieses Zellmodellaggregat (Abb. 33) muß aber der in physikalischer und chemischer Hinsicht gewichtige Einwand erhoben werden, daß von den 18 Zellmodellen nur 14 durch Valenzen miteinander verknüpft sind. Vier Zellmodelle, nämlich [4; 0; 0], [0; 4; 0], [0; 0; 4] und [4; 4; 4] entbehren dieser Verknüpfung; sie schweben sozusagen in der Luft. Die hier dargestellte Stellung dieser vier Zellmodelle ist zweifellos höchst labil. Keines derselben sitzt mit einer seiner vier sechseckigen Valenzflächen auf einer sechseckigen Fläche eines der 14 anderen Zellmodelle. Der geringste Stoß muß diese vier Zellmodelle umwerfen, so daß jedes derselben in stabile Lage, d. h. Sechseck auf Sechseck, auf eines der nächstbenachbarten Zellmodelle herumklappt. Läßt man aus der Abb. 33 diese vier Zellmodelle fort, so bleibt das Modell eines dreischichtigen (S. 19) Diamanttetraëdroids übrig. Zur Darstellung eines richtigen Hexaëdroids muß man also von einem Diamantraumgitterausschnitt ausgehen, der größer als ein Elementarwürfel ist. Die weitgehende Übereinstimmung der auf Grund der beiden oben angegebenen Leitsätze konstruierten Krystallmodelle mit den in der Natur vorkommenden, reinen Wachstumsformen des Diamanten darf wohl als ein Zeichen dafür aufgefaßt werden, daß man mit diesen beiden Leitsätzen auf dem richtigen Wege ist.

In den folgenden Abschnitten sind meist nicht die denkbar kleinsten Krystallmodelle

beschrieben und abgebildet, d. h. diejenigen, welche aus der denkbar kleinsten Anzahl von Zellmodellen aufgebaut sind; denn an manchen dieser äußerst kleinen Modelle kann man den Bau der Scheinflächen und die Beschaffenheit der Kanten und Ecken des Krystalls oft nicht so deutlich erkennen, wie an etwas größeren Modellen.

Zur Abbildung von Diamantkrystallmodellen, die aus Zellmodellen aufgebaut sind, verfährt man in folgender Weise. Zunächst wird der Aufriß (wenn nötig, auch noch der Grund- und Seitenriß) des abzubildenden Krystallmodells in der Weise entworfen, daß die Atome durch VAN 'T HOFFsche Atommodelle dargestellt werden. Diese Projektionen sind so einfach, daß man sie ohne Zirkel und Lineal auf Rechenpapier (Papier mit quadratischem Netz von 5 mm Maschenweite) im Maßstabe $d = 10$ mm oder 5 mm sehr leicht aus freier Hand zeichnen kann. Dann wird um den Aufriß eines jeden Atommodells, das an dem sichtbaren Teil der Oberfläche des Krystallmodells liegt, der sichtbare Teil des Aufrisses des zugehörigen Zellmodells unter Zuhilfenahme der Abb. 29—31 gezeichnet. Zum Schluß wird nach dieser Orthogonalprojektion die Abbildung in schiefer Projektion ausgeführt; vgl. hierzu die in gleichem Maßstabe gezeichneten Abb. 34, 35, und 36[1]) des aus 10 Atomen bestehenden Diamantoktaëdroids. In dem Aufriß, Abb. 34, geben die eingeschriebenen Zahlen die Längen der senkrecht auf der Aufrißebene (y, z-Ebene; Ebene des Papiers) stehenden Koordinaten an, ausgedrückt als Vielfache der Strecke d.

In komplizierteren Fällen, wie z. B. beim Oktaëder mit gekerbten Kanten, Rhombendodekaëder, Triakisoktaëder usw., ist es oft schwierig und unzweckmäßig, zunächst einen Aufriß in der Art der Abb. 34 zu entwerfen. In solchen Fällen ist es viel bequemer, von einem in der Art der Abb. 35 gezeichneten Aufriß oder Grundriß eines aus Zellmodellen aufgebauten Tetraëdroids, Oktaëdroids oder Hexaëdroids auszugehen. Solche Auf- oder Grundrisse kann man nach den hier mitgeteilten Beispielen in jeder beliebigen Größe auf Rechenpapier aus freier Hand sehr leicht entwerfen. Der Aufbau von Lamellen, der Abbau gewisser Atomschichten usw. kann an solchen Krystallmodellprojektionen zeichnerisch ebenso leicht und anschaulich durchgeführt werden, wie an Modellen. Alles weitere ergibt sich aus den folgenden Abschnitten.

A. Tetraëder.

Abb. 37 zeigt ein aus 30 ditetraëdrischen Zellmodellen zusammengesetztes, tetraëderförmiges Diamantkrystallmodell. Jede der vier Hauptflächen dieses Tetraëdroids setzt sich, abgesehen von den kleinen, tetraëderförmigen Vertiefungen, aus 10 regulären Sechsecken und 6 gleichseitigen, (punktierten) Dreiecken zusammen; diese 16 Flächenstücke liegen in derselben Ebene. Parallel zu jeder dieser ebenen Hauptbegrenzungsflächen gehen durch das Diamantkrystallmodell in gleichen Abständen drei ebene, durchgehende Trennungsfugen, die das Modell parallel zu jeder Hauptbegrenzungsfläche in vier gleichdicke, für die Diamantstruktur höchst charakteristische Schichten[2]) zerlegen. Der Abstand je zweier benachbarter, paralleler Trennungsfugen, senkrecht zu diesen gemessen, ist $4\,d\,/\sqrt{3}$, d. i. ein Drittel der Länge der räumlichen Diagonale des Elementarwürfels. Die hier benutzten Zellmodelle erfüllen den Raum nicht vollkommen (vgl. S. 17); im Innern des Krystallmodells befinden sich 5 Hohlräume; jeder derselben hat die Form eines regulären Tetraëders und ist ebenso groß, wie eine der Kerben an den Kanten oder eine der Vertiefungen auf der Oberfläche des Modells.

[1]) Hier wurde das ditetraëdrische Zellmodell benutzt; Näheres s. S. 20.

[2]) Identisch mit den Cyclohexanringschichten; vgl. „Die BAEYERsche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten", S. 10 ff.

Die Lage dieser tetraëderförmigen Hohlräume im Innern der Krystallmodelle kann man in folgender Weise angeben. Denkt man sich in Abb. 21 die Atome [2; 4; 2], [2; 4; 6], [3; 3; 1] und [3; 3; 5] sowie die hier nicht eingezeichneten Atome der nächsten Umgebung durch ditetraëdrische Zellmodelle dargestellt, so sind die zwei, in Abb. 21 gestrichelt eingezeichneten Tetraëder, deren Schwerpunkte die H-Punkte [2; 4; 4] und [3; 3; 3] sind, zwei der oben erwähnten tetraëderförmigen Hohlräume. Man erhält also im unbegrenzten Diamantraumgitter die Umrisse dieser Hohlräume, wenn man das System der Umrisse der VAN 'T HOFFschen Tetraëder gegen das System der Kohlenstoffatomschwerpunkte um die Hälfte der Elementarwürfelkante, d. i. also um $2d$, in der Richtung einer Würfelkante verschiebt.

Baut man das in Abb. 37 dargestellte Krystallmodell nicht aus ditetraëdrischen, sondern aus tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodellen zusammen, so sind die Kerben an den 6 Kanten des Tetraëdroids etwas weniger tief eingeschnitten, als auf der Abb. 37, und außerdem sattelförmig gestaltet, wie dies Abb. 38 zeigt, welche die obere Kante eines nur aus 3 Schichten bestehenden Tetraëdroids darstellt. Das mittelste Stück einer größeren Tetraëdroidfläche (111) zeigt Abb. 39. Die 7 regulären Sechsecke S_1 bis S_7 liegen in der Tetraëderfläche (111); E_1 bis E_3 sind einspringende, A_1 bis A_3 vorspringende Rhombendodekaëderecken. Im Innern des Krystallmodells sind natürlich gar keine Hohlräume vorhanden, da ja die hier verwendeten tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodelle sich lückenlos aneinanderschließen. Die parallel zu den Hauptbegrenzungsflächen durch das Krystallmodell hindurchgehenden Trennungsfugen sind nicht ganz eben; denn sie haben genau dieselbe Beschaffenheit wie die äußeren Begrenzungsflächen, die von der vollkommen ebenen Form nur wenig abweichen.

Aus den auf S. 17 dargelegten Gründen werden in den folgenden Abschnitten zum Aufbau der Diamantkrystallmodelle ausschließlich die bequemeren, ditetraëdrischen Zellmodelle statt der streng richtigen, tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen verwendet. Nach den zu den Abb. 38 und 39 gegebenen Erläuterungen kann man sich auch in den komplizierteren Modellen die kleinen Ergänzungen leicht hinzudenken, durch welche die in den folgenden Abschnitten enthaltenen Abbildungen in die der anderen Art übergeführt werden.

Eine andere Darstellung des hier besprochenen, 30 Atome umfassenden Diamantkrystallmodells ist bereits früher mitgeteilt worden.[1]) In dieser hier als Abb. 40 reproduzierten Zeichnung sind die Atome durch KEKULÉsche Modelle dargestellt und die Aufstellung des Tetraëdroids entgegen der in der Krystallographie allgemein üblichen so gewählt, daß eine dreizählige Achse senkrecht steht. Die vier, senkrecht zu dieser Achse liegenden Schichten des Modells sind hier deutlich zu erkennen.

Die Berechnung der Anzahl der Atom- oder Zellmodelle, aus denen sich ein tetraëderförmiges Krystallmodell zusammensetzt, ergibt sich aus der soeben erwähnten Abbildung 40. Die oberste, horizontale Schicht enthält 1 Atom, die zweite enthält $1 + [1 + 2] = 4$ Atome, die dritte Schicht $[1 + 2] + [1 + 2 + 3] = 9$ Atome, die n-te Schicht $[1 + 2 + 3 \cdots + (n-1)] + [1 + 2 + 3 + \cdots + n] = n^2$ Atome. Die Summe T_n der Atome, die in einem tetraëderförmigen Krystallmodell von n Schichten enthalten sind, ist demnach gleich der Zahl der Kugeln in einer quadratischen Kugelpyramide von n Schichten:

$$T_n = 1^2 + 2^2 + 3^2 + \ldots + n^2 = \frac{n \cdot (n+1) \cdot (2n+1)}{1 \cdot 2 \cdot 3}$$

Dieser Ausdruck geht in $T_n = \frac{n^3}{3}$ über, wenn n sehr groß wird. Den Chemiker interessiert

[1]) Die BAEYERsche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten, S. 13, Abb. 13.

der Quotient aus dieser Summe T_n und der Anzahl der freien Valenzen (Sechsecke) auf der Oberfläche des aus n Schichten bestehenden tetraëderförmigen Krystallmodells. Auf jeder seiner vier Flächen liegen $1+2+3+\ldots+n=\frac{n\cdot(n+1)}{2}$ freie Valenzen (vgl. z. B. Abb. 37 und 40); auf allen vier Flächen zusammen also $2n.(n+1)$. Der oben erwähnte Quotient ist also

$$Q_t=\frac{n\cdot(n+1)\cdot(2n+1)}{6\cdot 2\cdot n\cdot(n+1)}=\frac{2n+1}{12},$$

ein Ausdruck, der für sehr große Werte von n in $\frac{n}{6}$ übergeht.

Abb. 41, die Projektion des in Abb. 37 dargestellten, aus 30 Zellmodellen aufgebauten Krystallmodells auf eine Tetraëderfläche, zeigt, daß die Kantenlänge eines aus n Schichten bestehenden Krystallmodells gleich $2nk=2n\cdot d\sqrt{2}$ ist, wo d die z. B. in Abb. 4, 29, 30 und 31 angegebene Bedeutung hat. Da nach Bragg $k=1{,}25\cdot 10^{-8}$ cm ist[1]), so besteht ein Diamanttetraëder von der Kantenlänge $1\,\mu=10^{-4}$ cm aus

$$n=\frac{10^{-4}\text{ cm}}{2\cdot 1{,}25\cdot 10^{-8}\text{ cm}}=4000 \text{ Schichten.}$$

Die Anzahl T_n der Atome in einem solchen Krystall ist also $2{,}13\cdot 10^{10}$ und auf jede unabgesättigte Valenz kommen $Q_t=666$ bis 667 Kohlenstoffatome. Ganz abgesehen von anderen Argumenten macht diese Zahl es verständlich, daß die dicht nebeneinander angeordneten, freien Valenzen an der Oberfläche des Diamanten nicht die gleichen Eigenschaften zeigen, wie die freie Valenz des Triphenylmethyls.

Diese Betrachtungen über das Diamanttetraëdroid lassen leider nicht erkennen, warum wohlausgebildete Diamanttetraëder in der Natur fast gar nicht vorkommen.

B. Oktaëder.

Schneidet man von einem tetraëderförmigen, aus $2n$ Schichten bestehenden Diamantkrystallmodell (z. B. Abb. 37) an jeder Ecke ein tetraëderförmiges, aber nur aus n Schichten bestehendes Krystallmodell (Abb. 42) ab, so bleibt ein oktaëderähnliches, aus n-Schichten bestehendes Krystallmodell übrig (Abb. 36[2])). Dieses Polyeder ist, wenn man von den tetraëderförmigen Vertiefungen auf der Oberfläche absieht, kein Oktaëder, sondern eine Kombination zweier verschieden großer Tetraëder; denn auf vier Oktaëdroidflächen ist die Anzahl der Sechsecke (Valenzflächen der Zellmodelle) kleiner, als auf den vier anderen. Die Schich-

[1]) Proc. Royal Soc. 89, 277 [1913].

[2]) Baut man das durch Abb. 34—36 dargestellte, aus 10 Atomen bestehende Oktaëdroid in derselben Orientierung aus Kekuléschen Atommodellen auf, so erhält man das Modell der Abb. 22. In anderer Orientierung (eine dreizählige Achse senkrecht gestellt) findet man es in meiner früheren Mitteilung (Die Baeyersche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten, S. 8, Abb. 7), wenn man sich aus jener Abbildung entweder die Atommodelle 7, 8, 9 und 10 oder 11, 12, 13 und 14 hinwegdenkt. Eine Beschreibung und Abbildung des aus 10 Atomen bestehenden Oktaëdroids ist ferner in einer Mitteilung von A. Nold, Z. f. Krystallographie, 48, 323 und ebenda Tafel IV, Fig. 4 [1910] enthalten. Das Modell ist in dieser Figur nur schwer zu erkennen, da eine dreizählige Achse senkrecht auf der Ebene des Papiers steht und ungefähr auf das Auge des Beschauers gerichtet ist. Nold gibt an (l. c. S. 323), daß dieses Modell „die äußere Gestalt eines Tetraëders hat." Dies trifft nicht ganz zu. Genauer ist die Bezeichnung: Tetraëder mit abgestumpften Ecken; denn Nolds Modell erhält man, wenn man sich in Abb. 17 und 33 der vorliegenden Abhandlung die a c h t in den Elementarwürfelecken liegenden Atommodelle wegdenkt. Ein vollkommenes Tetraëdroid, und zwar ein dreischichtiges, erhält man, wenn man an diesen aus 10 Atommodellen bestehenden Torso die vier Atommodelle [0; 0; 0], [4; 4; 0], [4; 0; 4] und [0; 4; 4] wieder anbaut.

tung parallel den äußeren Hauptbegrenzungsflächen ist beim Modell des Oktaëdroids natürlich ebenso deutlich ausgeprägt, wie beim Tetraëdroid; vgl. Abb. 36, 45–47, 67 und 69; sie bringt die Spaltbarkeit des Diamanten deutlich zur Darstellung.

Die Anzahl n der Schichten, aus denen ein Oktaëdroidmodell besteht, bestimmt man am einfachsten und sichersten auf folgende Weise: jede der langen Oktaëdroidkanten gehört einer dreieckigen und einer sechseckigen Oktaëdroidfläche an. Die letztere stößt mit n Sechsecken (Valenzflächen) an die erwähnte Kante, die dreieckige Fläche hingegen nur mit $(n-1)$ Sechsecken. Die Anzahl n der Valenzflächen auf der Seite der sechseckigen Oktaëdroidfläche ist die Anzahl der Schichten, aus denen das Oktaëdroidmodell aufgebaut ist. Der Beweis hierfür ergibt sich aus dem Abbau eines Tetraëdroids von $2n$ Schichten zu einem Oktaëdroid von n Schichten (vgl. S. 21). Die Oktaëdroide von Abb. 67 und 69 bestehen demnach aus 4 bzw. 6 Schichten. Ist die Anzahl der Schichten n, so befinden sich auf jeder der vier kleinen Flächen des Oktaëdroids $1+2+3+\cdots+(n-1)=\frac{(n-1)\cdot n}{2}$ freie Valenzen (Sechsecke), auf jeder der vier größeren Flächen hingegen $1+2+3+\cdots+n=\frac{n\cdot(n+1)}{2}$ freie Valenzen (vgl. z. B. Abb. 36, 67 und 69). Die Differenz der Anzahl freier Valenzen auf zwei einander parallelen Oktaëdroidflächen ist also n; sie wächst zwar ihrer absoluten Größe nach mit zunehmender Schichtzahl. Verglichen mit der Gesamtzahl der freien Valenzen auf der Oberfläche des Oktaëdroids wird jedoch diese Differenz mit wachsender Schichtzahl immer kleiner und verschwindet schließlich praktisch vollkommen. Nun besteht ein Oktaëdroid von der Kantenlänge $1\,\mu = 10^{-4}$ cm aus 4000 Schichten (vgl. S. 21 und Abb. 41 und 45). Die Anzahl der freien Valenzen auf zwei parallelen Oktaëdroidflächen, also auch die Größe dieser beiden Flächen differiert hier nur um etwa $\frac{2}{n} = 0{,}5$ Promille. Ein Oktaëdroid von hinreichend großer Schichtzahl kann also von einem geometrisch vollkommenen Oktaëder praktisch nicht unterschieden werden.

Die Anzahl O_n der Atome in einem Oktaëdroid von n Schichten erhält man, wenn man von der Atomzahl eines Tetraëdroids von $2n$ Schichten die Atomzahl von vier Tetraëdroiden von n Schichten abzieht; es ist also nach S. 20 f.

$$O_n = T_{2n} - 4\,T_n = \frac{2n\cdot(2n+1)\cdot(4n+1)}{1\cdot 2\cdot 3} - 4\frac{n\cdot(n+1)\cdot(2n+1)}{1\cdot 2\cdot 3} = \frac{n}{3}(4n^2-1),$$

ein Wert, der gleich $\frac{4}{3}n^3$ wird, wenn n sehr groß wird. Die Anzahl der freien Valenzen auf der Oberfläche eines Oktaëdroids von n Schichten ist

$$4\{[1+2+3+\cdots+(n-1)]+[1+2+3+\cdots+n]\} = 4n^2.$$

Die Anzahl der Atome eines Oktaëdroids von n Schichten, dividiert durch die Anzahl der freien Valenzen auf der Oberfläche ist demnach $Q_o = \frac{n\cdot(4n^2-1)}{3\cdot 4n^2} = \frac{n}{3} - \frac{1}{12n}$ oder für sehr großes n einfach $\frac{n}{3}$. Im Diamantoktaëder von der Kantenlänge $1\,\mu$ kommen also rund 1333 Kohlenstoffatome auf eine unabgesättigte Valenz.

Wenn jedes Oktaëdroid immer in der Weise entstünde, daß sich zunächst an die vier Valenzen des „ersten" Kohlenstoffatoms, des „Krystallkeims", vier Atome anlagerten, so wäre das „erste Kriställchen" das aus fünf Atomen bestehende Tetraëdroid der Abb. 42. Aus diesem könnte dann durch einen Vorgang, dessen Beschreibung hier zu weit führen würde, ein aus drei Schichten, also aus 35 Atomen bestehendes Oktaëdroid entstehen. Wenn dann das Wachstum nach allen Richtungen mit idealer Gleichmäßigkeit fortschritte, würde aus

dem dreischichtigen der Reihe nach das fünf-, sieben-, neunschichtige Oktaëdroid entstehen und so fort, aber nicht das vier-, sechs-, achtschichtige (vgl. S. 30). Alle Oktaëdroide, deren Schichtzahl ungerade ist, enthalten als Mittelpunkt das „erste“ Kohlenstoffatom, den „Krystallkeim“. Die Oktaëdroide mit gerader Schichtzahl, deren Mittelpunkt zwar immer ein H-Punkt, aber nie ein Atomschwerpunkt ist, können also bei dem oben beschriebenen, ideal regelmäßigen Wachstum nicht entstehen. Trotzdem ist ihre Existenz nicht unmöglich, vielleicht nicht einmal unwahrscheinlich, denn es ist sehr fraglich, ob der Wachstumprozeß immer so regelmäßig ist und sich immer so abspielt, wie es oben angenommen wurde. Überhaupt ist in den vorliegenden Betrachtungen über die Diamantkrystallmodelle die Frage, ob sie in dieser ideal regelmäßigen Weise aus einem einzelnen Kohlenstoffatom entstehen können oder nicht, als zu hypothetisch beiseite gelassen. Der Kernpunkt unserer Untersuchung wird hiervon auch kaum berührt.

Auf den Oktaëderflächen des Diamanten finden sich sehr oft gleichseitig-dreieckige Wachstumsgrübchen, deren Umriß gegen den der Oktaëderfläche immer um 180⁰ verdreht ist. Abb. 43 zeigt ein Modell der Fläche (111) mit drei solchen Grübchen. Das oberste wird durch ein einziges Zellmodell ausgefüllt, das links unten gelegene durch ein dreischichtiges Tetraëdroid. Aber auch sechseckige Wachstumsgrübchen kommen auf Diamantoktaëdern vor, wenn auch nicht so häufig, wie die dreieckigen. Abb. 44 zeigt ein solches, von sechs schmalen Oktaëderflächen umrahmtes Grübchen. Aus dem Bau dieser sechs schmalen Flächen und aus dem Vergleich mit den Ikositetraëder- und Triakisoktaëderscheinflächen (Abb. 51 und 54) ersieht man, daß bei größerer Tiefe des Grübchens die sechs umrahmenden Flächen Ikositetraëder- und Triakisoktaëderscheinflächen sein können. Tatsächlich sind diese an solchen Stellen schon öfters beobachtet.

C. Die Hauyschen Decrescenzen des Diamanten.

Baut man ein Modell eines Tetraëdroids oder Oktaëdroids aus ditetraëdrischen oder tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodellen auf, so liegen, wie bereits erwähnt wurde, die wichtigsten Teile jeder einzelnen der äußeren Begrenzungsflächen, nämlich die sechseckigen Valenzflächen, in der Ebene der betreffenden Tetraëder- oder Oktaëderfläche. Sieht man von den kleinen, teils einspringenden, teils vorspringenden Pyramiden ab, die zwischen den Valenzflächen liegen, so kann man die Flächen des Tetraëdroid- und des Oktaëdroidmodells als eben bezeichnen. Dasselbe gilt von den vier, mehrfach erwähnten Scharen paralleler Trennungsfugen, die das Modell parallel zu den Tetraëderflächen in Schichten zerlegen. Die Lage der durchgehenden Trennungsfugen ergibt sich aus den Abb. 45, 46 und 47. Die beiden letzteren sind die Schnitte AB und CD durch das aus 84 ditetraëdrischen Zellmodellen aufgebaute, vierschichtige Oktaëdroid, dessen Projektion auf die x,y-Ebene Abb. 45 und dessen Darstellung in schiefer Projektion Abb. 67 zeigt. Die strichpunktierten Geraden in den Abb. 46 und 47 sind die drei vierzähligen Drehspiegelachsen des Modells, bzw. ihre Projektionen. Die in der Zeichenebene liegenden Zellmodellschwerpunkte der einen Raumgitterkomponente sind durch kleine Kreise dargestellt, die der anderen durch je zwei konzentrische Kreise. Auf der z-Achse sind die Niveaus der im Abstande d aufeinander folgenden, senkrecht auf der z-Achse stehenden Atomschwerpunktsebenen markiert. Die Projektionen der x- und der y-Achse sind in derselben Weise, jedoch in der der Projektionsrichtung entsprechenden Verkürzung ($d' = d / \sqrt{2}$) geteilt. Die schrägen, im Innern des Krystallumrisses liegenden Geraden, die den Tetraëderflächenwinkel ($70^0\ 32'$) einschließen, sind die Spuren derjenigen durchgehenden Trennungsfugen, die senkrecht auf der Ebene des Papiers stehen. Die Horizon-

talen sind, wie der Vergleich der Abb. 46 und 47 zeigt, Linien, in denen je zwei Trennungsfugen einander und die Ebene des Papiers unter spitzem Winkel schneiden. Mit l sind die kleinen, von der Zeichenebene geschnittenen, tetraëderförmigen Hohlräume bezeichnet.

Bei den folgenden Betrachtungen kommen von den vier Scharen von Trennungsfugen zunächst nur zwei in Betracht. In der Abb. 48 stehen diese beiden senkrecht auf der Ebene des Papiers. Diese Abbildung ist also, abgesehen von einigen Vereinfachungen, wie Abb. 47 ein Schnitt parallel der Rhombendodekaëderfläche (110) durch ein größeres, aus ditetraëdrischen Zellmodellen aufgebautes Diamantkrystallmodell. Alle Zellmodellschwerpunkte der einen Raumgitterkomponente, bzw. ihre Projektionen sind durch kleine Kreise markiert, die der anderen Komponente durch je zwei konzentrische Kreise. Während die Diamanttetraëdroid- und -oktaëdroidflächen in dem oben (S. 23) angegebenen Sinne als eben zu bezeichnen sind, kann keine der anderen, am Diamant beobachteten Krystallflächen (Würfel-, Rhombendodekaëderfläche usw.) am Modell durch eine ebene Fläche in dem oben definierten Sinne dargestellt werden. Wie die folgenden Betrachtungen zeigen, ist der Bau derjenigen Krystallflächen, die einer Oktaëderkante parallel sind, noch verhältnismäßig einfach; das sind, abgesehen von den Oktaëderflächen, die Flächen des Würfels {100}, der Ikositetraëder {11 n}[1]), der Triakisoktaëder {1 nn}[1]) und des Rhombendodekaëders {110}. Es ist klar, daß eine horizontale Würfelfläche (001) in der Nähe des Niveaus der x,y-Ebene nur dadurch entstehen kann, daß man das Krystallmodell (Abb. 48) durch eine senkrecht auf der Ebene des Papiers stehende, vielfach geknickte Fläche begrenzt, deren Spur beispielsweise den Linienzug 10, 9, 19, 18, 28, 27, 37, 36, 46, 45 . . . . bildet. Die Spur einer in der Nähe der z-Achse der Abb. 48 senkrecht auf der Papierebene stehenden Rhombendodekaëderfläche $(1\bar{1}0)$ ist der Linienzug 1, 2, 12, 13, 23, 24, 34, 35 . . . . Würfel- und Rhombendodekaëderfläche sind also besonders einfach gebaute Hauysche Decrescenzen. Diese vielfach geknickten Flächen sollen künftig als Scheinflächen bezeichnet werden, während z. B. die durch die x- und die y-Achse gelegte Ebene oder eine durch die geradlinige Spur 9, 18, 27, 36 . . . oder 10, 19, 28, 37 . . . charakterisierte, senkrecht auf der Zeichenebene stehende Ebene die krystallographische Äquivalentebene der oben erwähnten Würfelscheinfläche heißen soll. Natürlich ist auch die Spur 10, 8, 28, 26, 46, 44 . . . die einer Würfelscheinfläche. Im folgenden soll aber immer nur die denkbar feinst gefurchte Fläche ins Auge gefaßt werden. Die Spur 10, 8, 18, 16, 26, 24, 34, 32 . . . ist die der Ikositetraëderscheinfläche $(1\bar{1}3)$, denn die Achsenabschnitte (vgl. die Gerade 10, 18, 26, 34 . . .) verhalten sich wie $18d : -18d : 6d$. Die Spur 1, 3, 13, 15, 25, 27, 37 . . . ist die der Triakisoktaëderscheinfläche $(3\bar{3}1)$, deren Äquivalentebene die Ebene des Papiers in der Geraden 1, 13, 25, 37 . . . . schneidet.

In dem rhombischen Netz der Abb. 48 ist die halbe Länge der beiden Diagonalen jedes kleinsten Rhombus $2d$, bzw. $2d' = d\sqrt{2}$, die Länge der Seite eines kleinsten Rhombus gleich $d\sqrt{6}$. In Abb. 49 sei in der Spur ABC einer Stufe einer Ikositetraëderscheinfläche $\overline{AB} = b \cdot d \cdot \sqrt{6}$ und $\overline{BC} = c \cdot d \cdot \sqrt{6}$; b und c sind positive, ganze Zahlen und haben mit Rücksicht auf die hier vorausgesetzte, denkbar feinste Furchung der Scheinfläche keinen gemeinsamen Teiler außer 1; ferner ist $b > c$. Das Verhältnis der Achsenabschnitte der Äquivalentebene (Spur AC) ist demnach:

$$2(b+c) : -2(b+c) : 2(b-c) = 1 : -1 : \frac{b-c}{b+c}$$

[1]) $n > 1$.

Das MILLERsche Symbol der betreffenden Scheinfläche ist also $\left(1\,\bar{1}\,\frac{b+c}{b-c}\right)$. Ist andererseits das MILLERsche Symbol $(11n)$ einer Ikositetraëderscheinfläche gegeben, so muß $n = \frac{b+c}{b-c}$ sein, demnach $\frac{b}{c} = \frac{n+1}{n-1}$.

In Abb. 50 sei in der Spur FGH einer Stufe einer Triakisoktaëderscheinfläche $\overline{FG} = b \cdot d\sqrt{6}$ und $\overline{GH} = c \cdot d\sqrt{6}$; auch hier sind b und c positive, ganze Zahlen ohne gemeinsamen Teiler; ferner ist $b > c$. Demnach ist das Verhältnis der Achsenabschnitte der Äquivalentebene, deren Spur die Gerade FH ist,

$$2\,(b-c) : -2\,(b-c) : 2\,(b+c) = \frac{b-c}{b+c} : -\frac{b-c}{b+c} : 1.$$

Das MILLERsche Symbol der betreffenden Scheinfläche ist also

$$\left(\frac{b+c}{b-c}, -\frac{b+c}{b-c}, 1\right).$$

Ist das MILLERsche Symbol $(n n 1)$ einer Triakisoktaëderfläche gegeben, so muß hier genau wie oben $n = \frac{b+c}{b-c}$ und $\frac{b}{c} = \frac{n+1}{n-1}$ sein.

Das Profil der Stufen der Ikositetraëder- und Würfelscheinflächen ist durch den Tetraëderflächenwinkel ($\angle ABC$ in Abb. 49) charakterisiert, das Stufenprofil der Triakisoktaëder- und Rhombendodekaëderscheinflächen (vgl. Abb. 50 und S. 24) durch den Oktaëderflächenwinkel ($\angle FGH$ in Abb. 50). Etwas komplizierter kann der Stufenbau mancher Ikositetraëder- und Triakisoktaëderscheinflächen, z. B. (114), (116), (552), sein, deren MILLERsches Symbol aus zwei ungeraden und einer geraden Zahl besteht[1]); denn in diesen Fällen liegen auf der Äquivalentebene Zellmodellschwerpunkte nicht nur einer Raumgitterkomponente, wie es bisher stillschweigend vorausgesetzt wurde, sondern solche beider Komponenten. Ferner ist zu beachten, daß nur bei den allereinfachsten Werten des Verhältnisses $b : c$ der Stufenbau eindeutig definiert ist. Bei den komplizierteren Werten dieses Verhältnisses, z. B. schon bei $b : c = 3 : 2$, können Zweifel darüber entstehen, welcher von den verschiedenen, zu einer bestimmten Aquivalentebene gehörenden Scheinflächen der Vorzug vor den übrigen zu geben ist. Alles Nähere hierüber kann den Abb. 46, 47 und 48 entnommen werden.

In der mit der Formel $n = \frac{b+c}{b-c}$ berechneten Tabelle von S. 26 sind die MILLERschen Symbole derjenigen Flächen unterstrichen, die am Diamanten außer der Oktaëderfläche als ebene Krystallflächen sicher nachgewiesen sind[2]), soweit das Goniometerfernrohr die Flächen als eben erkennen läßt. Sie alle zeichnen sich, wie die Tabelle zeigt, durch besonders einfachen Stufenbau aus; bei allen ist $c = 1$. Daß die eine oder die andere Fläche, z. B. (113), deren Vorkommen man auf Grund dieser Tabelle erwarten sollte, bisher noch nicht beobachtet ist, hat seinen Grund wohl darin, daß die Flächen mit den auf S. 26 unterstrichenen Symbolen, wie v. FERSMANN und GOLDSCHMIDT hervorheben, als wirklich eben erscheinende Krystallflächen nur äußerst selten vorkommen (l. c. S. 60). Man darf also wohl hoffen, daß die Lücken

[1]) Hier wird vorausgesetzt, daß nur solche MILLERsche Symbole in Betracht gezogen werden, die aus drei ganzen Zahlen ohne gemeinsamen Teiler bestehen.

[2]) A. v. FERSMANN und V. GOLDSCHMIDT, Der Diamant, S. 6—7. Bei der von A. L. W. E. VAN DER VEEN (Zeitschr. f. Krystallographie und Mineralogie **51**, 589 [1912]) beobachteten Form {511} liegt, wie Herr Prof. V. GOLDSCHMIDT mir mitteilte, vielleicht eine Verwechslung mit einer Oktaëderfläche eines nach dem Spinellgesetz verzwillingten, im übrigen schwer erkennbaren Individuums vor.

in dieser von Theorie und Spekulation in Aussicht gestellten Reihe von Raritäten später vielleicht doch noch durch Beobachtungen ausgefüllt werden.

b	c	Ikositetraëderfläche	Triakisoktaëderfläche
1	1	$(1\,1\,\infty) = (1\,0\,0)$	$(1\,\infty\,\infty) = (1\,1\,0)$
2	1	$(1\,1\,3)$	$(1\,3\,3)$
3	1	$(1\,1\,2)$	$(1\,2\,2)$
3	2	$(1\,1\,5)$	$(1\,5\,5)$
4	1	$(1\,1\,\frac{5}{3}) = (3\,3\,5)$	$(1\,\frac{5}{3}\,\frac{5}{3}) = (3\,5\,5)$
4	3	$(1\,1\,7)$	$(1\,7\,7)$
5	1	$(1\,1\,\frac{3}{2}) = (2\,2\,3)$	$(1\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}) = (2\,3\,3)$
5	2	$(1\,1\,\frac{7}{3}) = (3\,3\,7)$	$(1\,\frac{7}{3}\,\frac{7}{3}) = (3\,7\,7)$
5	3	$(1\,1\,4)$	$(1\,4\,4)$
5	4	$(1\,1\,9)$	$(1\,9\,9)$
6	1	$(1\,1\,\frac{7}{5}) = (5\,5\,7)$	$(1\,\frac{7}{5}\,\frac{7}{5}) = (5\,7\,7)$
6	5	$(1, 1, 11)$	$(1, 11, 11)$
7	1	$(1\,1\,\frac{4}{3}) = (3\,3\,4)$	$(1\,\frac{4}{3}\,\frac{4}{3}) = (3\,4\,4)$
7	2	$(1\,1\,\frac{9}{5}) = (5\,5\,9)$	$(1\,\frac{9}{5}\,\frac{9}{5}) = (5\,9\,9)$
7	3	$(1\,1\,\frac{5}{2}) = (2\,2\,5)$	$(1\,\frac{5}{2}\,\frac{5}{2}) = (2\,5\,5)$
7	4	$(1\,1\,\frac{11}{3}) = (3, 3, 11)$	$(1\,\frac{11}{3}\,\frac{11}{3}) = (3, 11, 11)$
7	5	$(1\,1\,6)$	$(1\,6\,6)$
7	6	$(1, 1, 13)$	$(1, 13, 13)$

In dieser Tabelle fällt auf, daß das Symbol (113) bzw. (133) über (112) bzw. (122) steht, daß überhaupt ganz allgemein zu den Symbolen $(1 1 n)$ und $(1 n n)$ mit *geradzahligem* n viel größere b- und c-Werte gehören, als zu den Symbolen mit ungefähr gleich großem, aber *ungeradzahligem* n. So steht z. B. (116) durchaus nicht zwischen (115) und (117), sondern erst in weitem Abstande unter (117). Der Grund ist folgender. Wenn n eine *gerade* Zahl ist, sind die beiden Zahlen $(n+1)$ und $(n-1)$ in der Gleichung $\frac{b}{c} = \frac{n+1}{n-1}$ (vgl. S. 25) ungerade und haben keinen gemeinsamen Teiler, da ihre Differenz gleich 2 ist. Da nach der Voraussetzung von S. 24 und 25 auch b und c keinen gemeinsamen Teiler haben, muß $b = n+1$ und $c = n-1$ sein; b und c sind also die beiden ungeraden

Zahlen, die in der Zahlenreihe der geraden Zahl n unmittelbar benachbart sind; ferner ist hier $b+c=2n$.

Ist hingegen n ungerade, etwa gleich $(2p+1)$, wo $p=\frac{n-1}{2}$ eine ganze Zahl ist, so sind $n+1=2\,(p+1)$ und $n-1=2p$ gerade Zahlen. Sie haben also den gemeinsamen Teiler 2 und nur diesen, denn p und $p+1$ haben keinen. Hier ist also

$$\frac{b}{c}=\frac{n+1}{n-1}=\frac{p+1}{p}$$

Da auch b und c keinen gemeinsamen Teiler haben, ist $b=p+1=\frac{n+1}{2}, c=p=\frac{n-1}{2}$ und $b+c=n$. Bei ungeradem n ist also von den beiden Zahlen b und c die eine gerade und die andere ungerade, sie folgen einander in der Zahlenreihe unmittelbar und sind dem Bruche $\frac{n}{2}$ unmittelbar benachbart. Die oben erwähnte, bemerkenswerte Reihenfolge der Millerschen Symbole in der Tabelle von S. 26 findet also ihre Erklärung in der Gegenüberstellung der Gleichungen:

$b=n+1$ und $c=n-1$ für geradzahliges n und

$b=\frac{n+1}{2}$ und $c=\frac{n-1}{2}$ für ungeradzahliges n.

Im allgemeinen hält man eine Krystallfläche für um so „wahrscheinlicher“ und „einfacher“, je kleiner die Zahlen ihres Index oder ihrer Achsenabschnitte sind. Demnach müßte man beim Diamanten die Flächen (112) und (122) für einfacher und wahrscheinlicher halten, als die Flächen (113) und (133). Die Tabelle von S. 26 und die soeben besprochenen Betrachtungen zeigen aber einwandfrei, daß hinsichtlich ihres Stufenbaues die zuletzt genannten Flächen entschieden einfacher sind, als die ersteren.

Die Abb. 51 und 52 stellen die obere Hälfte eines Oktaëdroids dar, dessen obere Ecke durch die Fläche $(1\bar{1}3)$ abgestumpft ist. Der Unterschied besteht darin, daß die Firstkanten der Stufen in den beiden Abbildungen durch Zellmodelle der beiden verschiedenen Raumgitterkomponenten gebildet werden. Das auf Abb. 53 dargestellte Modell ist die Kombination des Oktaëdroids mit der Scheinfläche $(1\bar{1}2)$. Die Äquivalentebene $(1\bar{1}2)$ ist eine von denjenigen, auf welchen die Schwerpunkte von Zellmodellen beider Raumgitterkomponenten liegen (vgl. S. 25). In diesem Krystallmodell (Abb. 53) liegen die Schwerpunkte aller mit Nummern bezeichneten Zellmodelle auf der Äquivalentebene $(1\bar{1}2)$; die geradzahlig numerierten gehören der einen Komponente an, die ungeradzahlig numerierten der anderen. Daß hier immer die Schwerpunkte zweier unmittelbar benachbarter Zellmodelle in der Aquivalentebene $(1\bar{1}2)$ liegen (z. B.: 1 und 2, ferner 3 und 4 usw.) hat seinen Grund darin, daß diese Fläche einer Würfeldiagonale parallel ist. In der Abb. 53 liegen beispielsweise die Zellmodelle Nr. 3, 4, 11, 12, 23 und 24 auf einer und derselben Würfeldiagonale. Werden die ungeradzahlig numerierten Zellmodelle entfernt, so ändert sich an der Lage der Äquivalentebene zum Krystallmodell nichts.

Abb. 54 stellt den rechts, vorn, oben gelegenen Oktanten des Triakisoktaëders $\{133\}$ dar.

Die Abbildungen des Rhombendodekaëdroids (Abb. 59) und des Hexaëdroids (Abb. 70 und 71) werden auf S. 29 f. bzw. 31 besprochen.

Die Flächen der Tetrakishexaëder $\{1\,n\,0\}$ und der Hexakisoktaëder $\{1\,m\,n\}$ sind keiner Oktaëderkante parallel. Sie können daher an dem aus Zellmodellen aufgebauten Diamantkrystallmodell nicht durch so einfachen Stufenbau, wie die auf S. 26 angeführten Flächen dargestellt werden. Hier ist ein viel komplizierterer, nach zwei Richtungen abgestufter

Flächenbau nötig, wie Abb. 55 zeigt, die ein Stück eines großen Oktaëdroids darstellt, an welchem die obere Ecke und die vordere, obere Mittelkante durch die Hexakisoktaëderfläche (213) abgestumpft ist.[1]) Die Gesetzmäßigkeit des Baues der beiden hinteren Kanten der Fläche (213) zeigt sich deutlich erst bei größerer Ausdehnung dieser Fläche. Ebene Tetrakishexaëder- und Hexakisoktaëderflächen sind beim Diamant bisher noch nicht beobachtet. Es ist also unverkennbar, daß beim Diamant ebene Krystallflächen um so seltener sind, je komplizierter in dem hier dargelegten Sinne ihr Bau ist. Oktaëder-, Würfel-, Rhombendodekaëder-, Ikositetraëder- und Triakisoktaëderflächen sind, wenn sie reine Wachstumsformen sind, entweder eben oder (häufiger) geradlinig gestreift, jedenfalls nie gewölbt (krumm). Die sichtbare Streifung verläuft bei der Würfelfläche parallel zu zwei Tetraëderkanten[2]), auf den Flächen $\{110\}$, $\{11n\}$ und $\{1nn\}$ parallel zu einer Oktaëderkante. Gewölbte (krumme) Hexakisoktaëder- und Tetrakishexaëderflächen brauchen wohl nicht notwendig und nicht in allen Fällen durch Lösungsvorgänge diese krumme Beschaffenheit angenommen zu haben; sie können vermutlich in manchen Fällen reine Wachstumsformen sein.

In geometrischer Hinsicht sei zu Abb. 55 noch folgendes bemerkt. Die Bezifferung gibt die in der Richtung der z-Achse gemessenen Niveauunterschiede der Zellmodellschwerpunkte an. Die Maßeinheit ist d, d. i. ein Viertel der Länge der Elementarwürfelkante. Die ungeradzahlig bezifferten Zellmodelle gehören der einen Raumgitterkomponente an, die geradzahlig bezifferten der anderen. In der Äquivalentebene (213) liegen die Schwerpunkte aller numerierten Zellmodelle. Daß Zellmodellschwerpunkte beider Raumgitterkomponenten auf der Äquivalentebene liegen, hängt auch hier damit zusammen, daß die Äquivalentebene (213) einer Würfeldiagonale (Rhombendodekaëderkante) parallel ist. Zum Beispiel liegt der Schwerpunkt des mit 19 bezeichneten Zellmodells und die Schwerpunkte der rechts darunter liegenden mit den Nummern 18, 15, 14, 11 und 10 auf einer Würfeldiagonale. Auch an diesem Modelle kann man die ungerade bezifferten Zellmodelle entfernen, ohne an der Lage der Äquivalentebene zum Krystallmodell etwas zu ändern.

In Abb. 55 ist der Verlauf der einspringenden Kanten etwas schwierig erkennbar, da sich an jeder derselben eine Reihe kleiner, tetraëderförmiger Vertiefungen oder Trichter hinzieht, welche die einspringende Kante mehr verbirgt, als zeigt. Eine etwas schematisierte und hierdurch wesentlich vereinfachte Darstellung, bei der diese tetraëderförmigen Trichter fehlen, erhält man auf folgendem Wege. Man denke sich ein Diamantkrystallmodell aufgebaut, ganz ähnlich wie das durch Abb. 55 dargestellte, aber viel größer. Die Vergrößerung soll dadurch erreicht werden, daß an Stelle eines jeden Zellmodells der Abb. 55 ein Komplex vieler Tausender von Zellmodellen tritt, der hinsichtlich seiner äußeren Begrenzungsflächen einem ditetraëdrischen Zellmodell ähnlich ist. Abb. 57 zeigt einen solchen, allerdings nur aus 120 Zellmodellen bestehenden Komplex, bei welchem jede Kante fünfmal so lang ist wie die Kante eines ditetraëdrischen Zellmodells. An die Stelle der tetraëderförmigen Hohlräume, Trichter und Kerben des durch Abb. 55 dargestellten Modells denkt man sich in das vergrößerte Modell genau passende, tetraëderförmige Zellmodellkomplexe eingebaut. Bei Verwendung der soeben erwähnten, aus 120 Zellmodellen bestehenden Komplexe werden die großen, zwischen ihnen befindlichen tetraëderförmigen Hohlräume durch das aus 5 Zellmodellen bestehende Tetraëdroid (Abb. 42) gerade ausgefüllt. Man erhält so ein stark vergrößertes

[1]) Das Verhältnis der Achsenabschnitte $b:c = 3:1$ und $a:c = 3:2$ der Hexakisoktaëderfläche (213) kann man mit dem Zirkel in den Dreiecken ABC und DEF der Abb. 56 nachmessen.

[2]) Diese Streifungen nach zwei Richtungen können sich so durchkreuzen, daß die Scheinfläche ein System von Oktaëderecken bildet.

Krystallmodell, in dem zwischen den einzelnen Zellmodellen die kleinen, tetraëderförmigen Hohlräume, Trichter und Kerben zwar nicht fehlen, aber, verglichen mit den Dimensionen des vergrößerten Krystallmodells, so klein sind, daß man sie auf Abbildungen von nicht allzu gewaltiger Größe ohne wesentlichen Fehler ganz weglassen kann. Abb. 58 ist eine nach diesen Gesichtspunkten ausgeführte Schematisierung des in Abb. 55 dargestellten Modells. Durch die Vergrößerung sind alle unwesentlichen und störenden Einzelheiten der Abb. 55 zum Verschwinden gebracht, die wesentlichen Züge hingegen deutlicher hervorgehoben.

D. Rhombendodekaëder.

Das Modell eines aus 1233 Zellmodellen aufgebauten Rhombendodekaëdroids zeigt Abb. 59. Die hemiëdrischen Merkmale, die Furchung der Scheinflächen parallel zur längeren Diagonale und die Art des Stufenbaus sind deutlich erkennbar. Das nach S. 28—29 schematisierte Bild dieses Modells zeigt Abb. 60. Mit dieser Schematisierung soll natürlich nicht gesagt sein, daß ein kleines Kryställchen von der in Abb. 59 dargestellten Form sich zu einem großen Krystall von der Form der Abb. 60 auswachsen müsse. Es ist ja klar, daß die Zahl und die Breite der Furchen auf den Rhombendodekaëderflächen, sowie die Erhaltung oder Verwischung der Merkmale der Hemiëdrie von den mannigfaltigen, uns unbekannten, äußeren Umständen abhängen, die auf den Krystall während seines Wachstums Einfluß haben.

Es wurde bereits erwähnt, daß am Diamanten nur sehr selten Rhombendodekaëderflächen in so vorzüglicher Beschaffenheit vorkommen, daß sie vollkommen eben erscheinen. Meistens sind sie, sofern sie reine Wachstumsformen sind, deutlich erkennbar gestreift und zwar immer geradlinig und parallel zur längeren Diagonale, meist so grob, daß nicht mehr von „Flächen“, sondern nur von Scheinflächen die Rede sein kann. Das ist natürlich weiter nichts als eine etwa hunderttausendfache oder noch stärkere Vergröberung der auf Abb. 59 erkennbaren Furchung. Bemerkenswert ist die Ähnlichkeit dieser Abbildung, abgesehen von den hemiëdrischen Merkmalen, mit einer von Rose und Sadebeck stammenden und von A. v. Fersmann und V. Goldschmidt (l. c., S. 72) reproduzierten Abbildung eines Diamantkrystalls (Abb. 61). Einen 85 mg schweren Krystall mit ganz hervorragend schönen Rhombendodekaëderscheinflächen (Abb. 62) haben A. v. Fersmann und V. Goldschmidt beschrieben und abgebildet (l. c., S. 75, Kristall Nr. 4; Atlas Tafel 5, Fig. 35).

Jede Furche auf der Rhombendodekaëderscheinfläche in Abb. 59 wird von zwei parallelen Reihen von Valenzflächen (Sechsecken) gebildet. Die eine Reihe gehört zu Zellmodellen der einen Raumgitterkomponente, die andere zu solchen der anderen Komponente. Die Lage der Atomschwerpunkte stimmt in der Zinkblende, abgesehen von der Länge der Elementarwürfelkante mit der im Diamanten überein. Obwohl die Elementarbereiche der Zink- und der Schwefelatome wohl sicher verschieden groß, also auch verschieden geformt sind, unterscheidet sich doch vielleicht die Rhombendodekaëderfläche der Zinkblende nicht allzusehr von der hier (Abb. 59) dargestellten Scheinfläche des Diamanten. Unter dieser Voraussetzung besteht jede Furche der Scheinfläche bei der Zinkblende aus einer Reihe von Schwefelvalenzflächen, neben der eine (fast) genau so lange Reihe von Zinkvalenzflächen liegt. Die Rhombendodekaëderfläche der Zinkblende ist also elektrisch neutral und aus diesem Grunde eine Fläche minimaler Wachstumsgeschwindigkeit [1]). Wahrscheinlich liegt hierin einer der Gründe des häufigen Vorkommens der Rhombendodekaëderfläche bei der Zinkblende.

[1]) Vgl. J. J. P. Valeton, Physik. Zeitschr. 21, 606. [1920). Chem. Zentralblatt 1921, I. 724.

E. Oktaëder mit gekerbten Kanten (Kerbkanter).

Auf jeder Rhombendodekaëderscheinfläche des in Abb. 60 dargestellten Dodekaëdroids liegen fünf vorspringende Kanten. Durch eine kleine unwesentliche Änderung, die der Vergleich der Abb. 59 mit den Abb. 65 und 66 erkennen läßt (vgl. die Austrittspunkte der vierzähligen Drehspiegelachsen aus dem Polyeder), kann man ohne allzu große Änderung des Polyeders die Anzahl der vorspringenden Kanten auf jeder Rhombendodekaëdroidscheinfläche zu einer geraden machen. Abb. 63 ist eine nach S. 28 schematisierte Darstellung eines solchen Dodekaëdroids mit vier vorspringenden Kanten auf jeder Scheinfläche. Ein spezieller Fall einer solchen Scheinflächenbildung ist das Oktaëdroid mit gekerbten Kanten (Abb. 64). Hier ist nur die mittelste Furche jeder einzelnen der in Abb. 63 erkennbaren Dodekaëderscheinflächen ausgebildet. Ein aus 184 ditetraëdrischen Zellmodellen aufgebautes Oktaëdroid mit gekerbten Kanten, projiziert auf (100), zeigt Abb. 65, in schiefer Projektion Abb. 66. Es ist nach dem oben Gesagten das Modell eines Oktaëdroids, dessen Kanten durch die denkbar schmalsten Rhombendodekaëdroidscheinflächen abgestumpft sind. Vergröbern sich bei weiterem Wachstum die Furchen, so entsteht ein Kerbkanter. Ein solches Modell ist hinsichtlich seiner Struktur in allen seinen Teilen, auch um die einspringenden Kanten herum und in der nächsten Umgebung der vierzähligen Drehspiegelachsen und der durch sie gelegten, den Würfelflächen parallelen Ebenen durchaus homogen. Überall steht jedes Zellmodell invers zu seinen nächsten Nachbarn. Nirgends findet man auch nur das geringste Anzeichen von Zwillingsbildung. Wäre der Kerbkanter ein Durchwachsungszwilling, so müßten im Modell die zu beiden Seiten der Zwillingsebenen stehenden Zell- oder Atommodelle spiegelbildlich, aber nicht invers zueinander stehen. Das ist aber ohne vollkommene Änderung der Form der Atom- oder Zellmodelle ganz unmöglich (vgl. hingegen die Spinellzwillinge, S. 31 f.). Jedenfalls ist bei Benutzung der Zellmodelle die Auffassung des Kerbkanters als Wachstumsform des nicht verzwillingten Diamanten die einfachste und nächstliegende. Natürlich weist das hier besprochene Modell (Abb. 65 und 66) einige kleine, aber charakteristische Abweichungen von den bisher üblichen, schematisierten Abbildungen der Kerbkanter auf. Zum Beispiel liegen die vier horizontalen, einspringenden Kanten nicht in der durch den Modellschwerpunkt gelegten Horizontalebene; die vorn links und die hinten rechts befindliche liegen um $\frac{d}{2}$ tiefer, die beiden anderen um $\frac{d}{2}$ höher, als der Modellschwerpunkt (vgl. Abb. 65). Ähnlich ist es bei den acht anderen Kanten. Doch verschwinden natürlich alle diese ungeheuer kleinen hemiëdrischen Merkmale mit zunehmendem Wachstum gegenüber den Dimensionen des Krystalls schließlich praktisch vollkommen.

Nahe Beziehungen zwischen dem Oktaëdroid und dem Kerbkanter zeigt folgende Betrachtung. Setzt man auf jede sechsseitige Valenzfläche, die an der Oberfläche des vierschichtigen Oktaëdroids (Abb. 67) liegt, je ein Zellmodell in der durch die Diamantstruktur vorgeschriebenen inversen Stellung, so erhält man das durch Abb. 68 dargestellte Polyeder. Durch Einbau weiterer Zellmodelle zwischen die soeben erwähnten entsteht zunächst der Kerbkanter von Abb. 66 und aus letzterem durch Ausfüllung der Kerben das sechsschichtige Oktaëdroid von Abb. 69 [1]). Man kann also den Kerbkanter (Abb. 66) als eine zwischen den beiden Oktaëdroïden der Abb. 67 und 69 stehende Zwischenform auffassen. Daß der Wachstumsprozeß sich in Wirklichkeit nicht so abspielen muß, wie er hier geschildert ist, ist ohne

[1]) Die durch die Ziffern 1 bis 9 gekennzeichneten Flächenstücke der Abb. 66 sind identisch mit den gleich bezeichneten Flächenstücken der Abb. 68 und 69. Auf der vorn, links, unten gelegenen Oktaëdroidfläche ist die Bezifferung nur infolge Platzmangels weggelassen.

weiteres klar. Der Hauptzweck dieser Darlegung ist der, möglichst klar zu zeigen, daß die Struktur des Kerbkanters genau dieselbe ist, wie die eines gewöhnlichen Oktaëdroids.

F. Würfel.

Abb. 70 zeigt in schiefer Projektion ein aus 171 ditetraëdrischen Zellmodellen zusammengesetztes Hexaëdroid. Die Merkmale hexakistetraëdrischer Symmetrie zeigen sich hier deutlicher als beim Oktaëdroid, denn dieser Scheinwürfel ist ja nichts anderes, als ein Tetraëdroid mit zwei Lamellen auf jeder Fläche. Daß an den würfelförmigen Diamantkrystallen von dieser Hemiëdrie nichts zu erkennen ist, hat folgenden Grund. Trägt man von dem Hexaëdroid der Abb. 70 die vorderste, die linke und die oberste Zellmodellschicht ab und baut an den Torso hinten, rechts und unten je eine neue wieder an, jedes Zellmodell selbstverständlich invers zu seinen Nachbarn, so erhält man das Hexaëdroid der Abb. 71, welches man sich aus Abb. 70 auch durch Spiegelung an einer Würfelfläche entstanden denken kann[1]). Zur Orientierung sei angeführt, daß die beiden kleinen, in beiden Abbildungen mit A und B bezeichneten Dreiecke (vorn links oben und vorn rechts unten) identische Flächen und ein großer Teil des sie direkt verbindenden, teils punktierten, teils ausgezogenen Linienzuges auf beiden Abbildungen identische Kanten darstellen. Von zwei Zellmodellschichten, die in einem Diamantkrystallmodell parallel zu einer Würfelfläche liegen und (im Abstande d) unmittelbar aufeinander folgen, ist also immer die eine von rechts oben nach links unten und die andere von links oben nach rechts unten gefurcht. Treten beim Wachstum des Kristalls auf einer Würfelscheinfläche örtliche und zeitliche Störungen auf, so kann sich die Streifung vergröbern. Je nachdem, in welcher Atomschicht die Vergröberung begann, verläuft die Streifnng in der Richtung der einen oder der anderen Diagonale der betreffenden Würfelfläche. Hierdurch entsteht die häufig beschriebene Musterung der Würfelflächen, die sich aus Quadraten oder Rechtecken zusammensetzt, deren Seiten den Diagonalen der Würfelfläche parallel laufen; vgl. z. B. die dem Atlas von A. v. Fersmann und V. Goldschmidt entnommenen Abb. 72 und 73 (Fig. 153 und 155 des genannten Atlas).

Abb. 74 zeigt ein aus 1717 Zellmodellen zusammengesetztes Modell, das einem von v. Fersmann und Goldschmidt[2]) beschriebenen und abgebildeten Kristall nachgebildet ist (vgl. die Reproduktion der Fersmann-Goldschmidt schen Abbildung, Abb. 76). Man kann dieses Modell als ein Aggregat vieler gleichgroßer, parallel stehender, einander teilweise durchdringender Oktaëdroide betrachten, die zusammen eine Kombination von $\{100\}$, $\{110\}$ und $\{111\}$ bilden. Man erkennt besonders deutlich an den Flächen (010) und (001) der Abb. 74, daß diese Scheinflächen entweder als Systeme von Oktaëdroid*ecken* oder aber, mit Rücksicht auf die regelmäßige Anordnung dieser Ecken in langen Reihen, auch als Tetraëdroid*kanten* aufgefaßt werden können; vgl. auch Abb. 75, die nach S. 28—29 ausgeführte Schematisierung der Abb. 74. Auf dem unteren Teile der Fläche (100) ist der Beginn der Bildung der nächsten Zellmodellschicht durch Anbau von sechs Zellmodellen angedeutet. An dieser Stelle verläuft daher die Streifung der Würfelfläche nicht von links unten nach rechts oben, sondern von rechts unten nach links oben.

G. Spinellzwillinge.

Zwei Zellmodelle, die sich mit je einer sechseckigen Fläche berühren, aber nicht invers wie in Abb. 77, sondern spiegelbildlich zueinander stehen wie in Abb. 78, sind das Modell des

[1]) Dieser Umbau ist bemerkenswert als eine nicht alltägliche Umwandlung eines Gegenstandes in sein Spiegelbild.

[2]) Der Diamant, S. 121, Kristall 15, Fig. 37 des Atlas.

denkbar kleinsten Spinellzwillings. Die Zwillingsebene ist die Fläche, in der sich die beiden Zellmodelle berühren.

Man kann zwei aus ditetraëdrischen Zellmodellen aufgebaute, beliebig ausgedehnte Cyclohexanringschichten so aufeinander legen, daß sie zueinander spiegelbildlich hinsichtlich der Trennungsfrage, d. h. also: hinsichtlich einer Oktaëderfläche, stehen. Führt man den Versuch aber mit tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodellen aus, so stößt man auf folgende Schwierigkeit. Abb. 39 zeigt ein Stück einer aus tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodellen aufgebauten Cyclohexanringschicht (Oktaëdroidoberflächenschicht; vgl. S. 20). Legt man auf sie in normaler, d. h. nicht in Zwillingsstellung, eine zweite Schicht derselben Bauart, so passen die vorspringenden Rhombendodekaëderecken A_1, A_2, A_3, ... der unteren Schicht genau in die einspringenden Ecken der oberen, und umgekehrt die vorspringenden der oberen Schicht in die einspringenden Ecken (E_1, E_2, E_3 ...) der unteren. Denkt man sich nun die obere Schicht um den Mittelpunkt des mittelsten Sechsecks S_1 um 180^0 gedreht (oder um 60^0, was ja auf dasselbe hinauskommt), so finden nach vollendeter Drehung, d. i. also in der Spinellzwillingsstellung, die nach unten vorspringenden Ecken der oberen Schicht in der unteren keine Vertiefungen vor, sondern im Gegenteil nach oben emporragende Ecken. Die beiden Schichten passen also in dieser Stellung nicht mehr lückenlos aufeinander. Das ditetraëdrische Zellmodell ist hier also dem tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen vorzuziehen. Das erstere enthält die vielleicht zwar zutreffende, aber doch noch unbewiesene Hypothese, daß der Abstand der Schwerpunkte zweier Kohlenstoffatome in Spinellzwillingsstellung genau so groß ist, wie in nicht verzwillingter (inverser) Stellung.

Etwas komplizierter, als das oben erwähnte, einfachste, nur aus zwei Zellmodellen bestehende Spinellzwillingsmodell ist ein aus acht ditetraëdrischen Zellmodellen zusammengesetztes Modell (Abb. 79), das den sogenannten Nahtsteinen schon recht ähnlich ist[1]). Noch etwas größer ist das aus zwei spiegelbildlich zueinander gestellten Cyclohexanringen bestehende Krystallmodell (Abb. 80), das die einspringenden Kanten an der Zwillingsebene erkennen läßt. Eine Abbildung in etwas anderer Orientierung (Zwillingsebene horizontal) erhält man, wenn man sich in der Abb. 8 auf S. 9 meiner in der Fußnote 1 erwähnten Mitteilung den oberen oder den unteren Cyclohexanring wegdenkt.

Es ist unmöglich, das Modell eines kleinen Spinellzwillings aus dem eines kleinen Oktaëdroids durch Hemitropie herzustellen. Denn erstens hat das Modell des Oktaëdroids kein Symmetriezentrum und zweitens geht durch den Modellschwerpunkt, d. h. durch den Schnittpunkt der drei vierzähligen Drehspiegelachsen keine Trennungsfuge; vgl. Abb. 46 und 47[2]). Jede der vier Trennungsfugen *EF*, *GH*, *IK* und *LM*, die möglichst nahe am Schwerpunkt des Oktaëdroids vorbeigehen, teilt dieses Modell in zwei ungleiche Hälften; doch wird die relative Größe dieser Ungleichheit mit zunehmender Größe des Oktaëdroids allmählich verschwindend klein.

Zwei der früher erwähnten[3]), vollkommen spannungsfreien Anordnungen von Kohlenstoffatommodellen sind nichts anderes, als Diamantraumgittermodelle, die aus vielen parallelen

---

[1]) Eine Abbildung desselben, aber aus Kekulé schen Atommodellen aufgebauten Krystallmodells in etwas anderer Orientierung (Zwillingsebene horizontal) ist bereits früher veröffentlicht worden; vgl. die Baeyersche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten, S. 9, Abb. 9. Vgl. ferner A. Nold, Ztschr. f. Krystallographie **48**, Tafel IV, Fig. 6 [1910].

[2]) Besteht das Oktaëdroid aus einer ungeraden Anzahl von Schichten, so fällt sein Schwerpunkt mit dem des mittelsten Zellmodells zusammen, kann also auch in diesem Falle nicht in einer Trennungsfuge liegen.

[3]) Die Baeyersche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten. Abb. 14 und 15. Vgl. auch A. Nold, Chemiker-Ztg. **29**, 174 [1905]; Ztschr. f. Kryst. **48**, 321 und Tafel IV, Fig. 7 [1910].

Spinellzwillingslamellen von denkbar kleinster bzw. doppelt so großer Dicke bestehen. Entgegen der früher geäußerten Vermutung haben diese beiden Atomanordnungen, wie sich inzwischen herausgestellt hat, mit der Struktur des Graphits [1]) nichts zu tun.

Besonders bemerkenswert sind einige nach dem Spinellgesetze gebaute cyclische Viellinge [2]). Man kann fünf ditetraëdrische Zellmodelle so aneinander bauen, daß das erste zum zweiten, das zweite zum dritten, das dritte zum vierten und dieses zum fünften in Zwillingsstellung steht, daß ferner die fünf Zellmodellschwerpunkte in derselben Ebene liegen, und daß die vier Zwillingsebenen sich in einer Geraden schneiden, die auf der Schwerpunktsebene senkrecht steht (vgl. Abb. 81). Die fünf Zellmodelle schließen sich nicht völlig zu einem Ringe zusammen, da $5 \times 70^0 32' = 360^0 - 7^0 20'$ ist (genauer: $360^0 - 7^0 21'$). Dieser Kristallkeim (Abb. 81) muß bei ganz gleichmäßigem Wachstum aller fünf Teile einen cyclischen Fünfling mit einem schmalen, keilförmigen Spalt zwischen dem ersten und fünften Sektor ergeben. A. v. Fersmann und V. Goldschmidt beschreiben (a. a. O., S. 204, Kristall Nr. 123; Atlas Fig. 266 und 267) einen besonders schönen cyclischen Vielling dieser Art (Abb. 82), der aber nicht aus fünf, sondern aus sechs Teilen besteht. Die Stellung der Keime der ersten fünf Teile stimmt im wesentlichen mit der in Abb. 81 dargestellten überein. Der Keim des sechsten muß zwischen dem ersten und fünften Teile des Sechslings in Zwillingsstellung zu einem dieser beiden Teile stehen und zwar in dem Spalt dort, wo er breit genug für mindestens ein Kohlenstoffatom ist [3]).

Den aus Kekuléschen Atommodellen aufgebauten Keim des oben besprochenen cyclischen Fünflings zeigt Abb. 83. Dieses in der organischen Chemie wohlbekannte Modell wird im stereochemischen Unterricht bei der Besprechung der Baeyerschen Spannungstheorie regelmäßig zu dem Nachweis benutzt, daß aus fünf einfach miteinander verbundenen Kohlenstoffatommodellen ein fast vollkommen spannungsfreier, ebener Ring gebildet werden kann, eine Erkenntnis, die zum Ausbau wichtiger Teile der Chemie der alicyclischen Verbindungen wesentlich beigetragen hat. Die Bedeutung dieses einfachen Modells für zwei anscheinend so weit voneinander entfernte Gebiete ist gewiß bemerkenswert.

Schwieriger, als die Deutung der Struktur der Kontaktzwillinge, ist die der Durchwachsungszwillinge, die aus zwei einander durchkreuzenden Oktaëdern oder wie beim Flußspat aus zwei einander durchkreuzenden Würfeln bestehen. Es ist möglich, wenn auch nicht gerade einfach, beim Diamanten diese Durchwachsungszwillinge von einfachen Kontaktzwillingen abzuleiten. Bei diesen Durchwachsungszwillingen und bei den von mehreren, nicht parallelen Zwillingslamellen durchwachsenen Diamantkrystallen (A. v. Fersmann und V. Goldschmidt, Kristall Nr. 32, 33, usw.) berühren sich Teile eines Viellings außer an Zwillingsebenen auch an solchen Verwachsungsflächen die nicht Zwillingsebenen sind. Die Frage nach der Struktur in der nächsten Nähe dieser Flächen ist schwierig zu beantworten. Sowohl das ditetraëdrische, als auch das tetraëdrisch-rhombendodekaëdrische Zellmodell gibt hier eine in mancher Hinsicht unbefriedigende Auskunft.

---

[1]) Vgl. P. Debye und P. Scherrer, physik. Ztschr. **18**, 291—301 [1917].

[2]) Vgl. A. v. Fersmann und V. Goldschmidt, Der Diamant, S. 204—208.

[3]) Diese Betrachtung faßt nur die durch die geometrischen Verhältnisse bedingte Möglichkeit einer besonders einfachen und regelmäßigen Aneinanderlagerung der Atom- oder Zellmodelle ins Auge; in Wirklichkeit können die einzelnen Teile des Viellings natürlich in etwas anderer Reihenfolge und in anderer, etwas weniger regelmäßiger Weise zusammengetreten sein.

H. Diamantkrystallmodelle von ditrigonal-skalenoëdrischer Symmetrie.

Das kleinste Krystallmodell dieser Art besteht aus zwei invers zueinander stehenden Zellmodellen (vgl. Abb. 84; hier steht die trigonale Achse senkrecht). Der Mittelpunkt dieses Modells ist ein in der Mitte zwischen zwei nächstbenachbarten Atomschwerpunkten liegendes Symmetriezentrum. Ein aus 16 Zellmodellen aufgebautes Modell zeigt Abb. 85. Sein Mittelpunkt ist ein Cyclohexanringmittelpunkt. Die mittelste Schicht dieses Modells ist nämlich ein Cyclohexanring. Man kann dieses Modell entweder als ein sehr verzerrtes Oktaëder auffassen oder als ein Rhomboëder, dessen Flächenwinkel gleich dem Oktaëder- und dem Tetraëderflächenwinkel ist. Krystalle dieser Art scheinen bisher noch nicht beschrieben zu sein.

Die auf S. 18—34 besprochenen Betrachtungen und die zugehörigen Abbildungen zeigen, daß man die morphologischen Merkmale der reinen Wachstumsformen des Diamanten aus dem Diamantraumgitter unter Benutzung des Zellmodells deduzieren kann und zwar mit solcher Vollständigkeit und Genauigkeit, daß am Krystallmodell auch die feinsten Einzelheiten der Oberflächenbeschaffenheit der verschiedenen Krystallformen naturgetreu zur Darstellung kommen.

7. Abschnitt.

Relative Valenzdichte auf den verschiedenen Krystallflächen.

P. P. Ewald[1]) hat wohl als erster den Gedanken ausgesprochen, daß, abgesehen von anderen Faktoren, ein Krystall längs einer bestimmten Fläche um so leichter gespalten oder zerrissen werden kann, je geringer auf dieser Fläche die Anzahl der zu zerreißenden Bindungen pro Flächeneinheit ist. P. P. Ewald gibt für die relative Valenzdichte auf den wichtigsten Krystallflächen des Diamanten folgende Werte an:

Oktaëderebene I . . .	1
Oktaëderebene II . . .	3
Rhombendodekaëderebene	1,53
Würfelebene	1,74

Die Krystallfläche mit der geringsten relativen Valenzdichte ist die „Oktaëderebene I", d. i. diejenige Krystallfläche, die die in Abb. 36, 67 und 69 dargestellten Krystallmodelle zeigen; Abb. 68 zeigt ein durch Ewalds „Oktaëderebene II" begrenztes Oktaëdroid. Der genaue Wert der relativen Valenzdichte auf der Würfelebene ist, wie unten gezeigt werden wird, gleich $\sqrt{3} = 1{,}73205$; der für die Rhombendodekaëderebene ist $\sqrt{\frac{3}{2}} = 1{,}22475$ und nicht, wie Ewald angibt, 1,53.

Mit Rücksicht darauf, daß bei den hier besprochenen Betrachtungen, abgesehen von der Oktaëderebene I nach Ewald, alle Flächen der aus Raumzellmodellen aufgebauten Diamantkrystallmodelle Scheinflächen sind, muß hier zunächst die Flächeneinheit der Scheinfläche definiert werden. Unter der Flächeneinheit der Scheinfläche soll hier ein solches Stück der Scheinfläche verstanden werden, welches durch Projektion eines Stückes der zugehörigen

[1]) P. P. Ewald, Ann. d. Phys. **44**, 281 [1914]; P. P. Ewald und W. Friedrich, Ann. d Phys. **44**, 1196 [1914]; Rudolf Scharizer, Ztschr. f. Krystallographie **55**, 440 [1920]; A. Thiel, Ber. d. deutsch. chem. Ges. **53**, 1382 [1920].

Äquivalentebene von der Größe der Flächeneinheit auf die Scheinfläche aus dieser ausgeschnitten wird. Die Flächeneinheit muß so groß gewählt werden, daß sie viele Tausende oder Millionen Valenzflächen (Sechsecke der Raumzellmodelle) umfaßt.

Die relative Valenzdichte q auf einer beliebigen Scheinfläche eines Diamantkrystallmodells ist gleich der Anzahl der freien Valenzen auf der Flächeneinheit dieser Scheinfläche, dividiert durch die Anzahl der freien Valenzen auf der Flächeneinheit der Oktaëderfläche (Oktaëderebene I nach Ewald).

Zur Ableitung eines Ausdrucks für den Zusammenhang der relativen Valenzdichte q mit den Achsenabschnitten oder mit dem Millerschen Symbol der betreffenden Scheinfläche dient folgende Überlegung. Abb. 86 zeigt ein vierschichtiges Oktaëdroidmodell, projiziert auf die Grundrißebene (001). Wird das mit 1 bezeichnete, dem Beschauer zunächst liegende Zellmodell entfernt, so erhält man ein Modell, wie es in Abb. 87 dargestellt ist.[1]) Durch Abbau der Zellmodelle Nr. 2 bis 8 in der Reihenfolge dieser Numerierung entstehen die in den Abb. 88—90 dargestellten Krystallmodelle. Durch diesen Abbau entsteht an dem Oktaëdroid schließlich (Abb. 90) eine Scheinfläche $(1\bar{1}3)$ ähnlich, nur nicht ganz so groß, wie die Scheinfläche $(1\bar{1}3)$ in Abb. 51.

Es ist wesentlich, daß man in jeder Phase dieses Abbaues immer nur solche Zellmodelle wegnimmt, von denen in dieser Phase des Abbaues je zwei Sechsecke in der hier gewählten Projektion vollständig sichtbar sind. Bei Beachtung dieser Regel entsteht nämlich bei der Wegnahme eines jeden Zellmodells aus einem Grundrißstück von der in Abb. 91 dargestellten Art ein solches, wie es Abb. 92 zeigt. Die Anzahl der Sechsecke im Grundriß bleibt also in allen Phasen des Abbaues vollkommen unverändert. Daher enthält jede der fünf Abb. 86—90 gleichviele Sechsecke, nämlich 32.

Bei dieser Betrachtung ist es notwendig, das Oktaëdroid und die zu untersuchende Scheinfläche auf diejenige Würfelfläche zu projizieren, die senkrecht auf dem kürzesten Achsenabschnitt der Scheinfläche steht. Sind zwei Achsenabschnitte der Scheinfläche gleich kurz und kürzer als der dritte, so ist es natürlich gleichgültig, welchen von den beiden kürzesten Achsenabschnitten man als Projektionsrichtung wählt. Nimmt man die Richtung eines der längeren oder die des längsten Achsenabschnittes als Projektionsrichtung, so überdecken sich die einzelnen Teile der Scheinfläche so, daß in der Projektion der Scheinfläche ein großer Teil, in manchen Fällen sogar fast die Gesamtheit aller Sechsecke unsichtbar ist. Zum Beispiel zeigt der Vergleich der Abb. 90 mit Abb. 93, der Projektion der durch Abb. 90 dargestellten Kombination von $\{111\}$ mit $(1\bar{1}3)$ auf (100), daß durch die Projektion der Scheinfläche $(1\bar{1}3)$ in der Richtung einer der beiden längsten Achsenabschnitte fünf und ein halbes Sechseck dieser recht kleinen Scheinfläche verdeckt werden. Noch krasser ist natürlich der Grad der Überdeckung, wenn man eine Würfelscheinfläche, z. B. (001), auf eine andere Würfelfläche, z. B. (100), projiziert. In diesem Falle werden bis auf einen verhältnismäßig sehr kleinen Rest alle Sechsecke der Scheinfläche verdeckt. In solchen Fällen kann man aus der Projektion der Scheinfläche die Anzahl der auf ihr liegenden Sechsecke entweder gar nicht oder nur auf Grund recht weitschweifiger Überlegungen ableiten.

Die Befolgung der Vorschrift, als Projektionsrichtung die Richtung des kürzesten Achsenabschnittes zu wählen, erweist sich übrigens bei genauerer Betrachtung als eine unerläßliche Voraussetzung für die Durchführbarkeit der oben gegebenen Abbauvorschrift; denn man kann die Abbauvorschrift nur einhalten, wenn man von vornherein als Projektionsrichtung die Richtung des kürzesten Achsenabschnittes gewählt hat.

[1]) Die dick gestrichelten Geraden in den Abb. 87—92 bedeuten einspringende Kanten.

Man kann an jedem hinreichend großen Oktaëdroid nach der soeben besprochenen Abbauregel alle in den vorhergehenden Abschnitten erwähnten Scheinflächen (Würfel-, Ikositetraëder-, Rhombendodekaëder-, Triakisoktaëder-, aber auch Tetrakishexaëder- und Hexakisoktaëderscheinflächen) erzeugen und nach der oben erwähnten Projektionsregel abbilden. Daher gilt für alle so erzeugten Scheinflächen und Projektionen der Satz: Auf der Projektion jeder solchen Scheinfläche liegen ebensoviele Projektionen von Valenzflächen (Sechsecke), wie auf einem gleich umfangreichen Stück der Projektion einer gewöhnlichen Oktaëderfläche (Oktaëderebene I nach Ewald). Damit dieser Satz streng gilt, müssen die Projektionen der Scheinfläche und der Oktaëderfläche sehr groß sein im Vergleich mit einer Valenzfläche, d. h. sie müssen sehr viele Sechsecke enthalten.

In der Abb. 97 sei ABC die Oktaëderfläche (111) und ADE die Äquivalentebene einer beliebigen Scheinfläche $A'D'E'$ eines Diamantkrystallmodells. Diese Scheinfläche, deren Ausdehnung, verglichen mit den Dimensionen eines Zellmodells, sehr groß sein soll, ist in die Abbildung nicht eingezeichnet, da ihre sehr zahlreichen Stufen und Spitzen bei einer so kleinen Abbildung nicht zu erkennen sind. Die Abbildung der Scheinfläche fällt also hier mit der Abbildung der Äquivalentebene praktisch vollkommen zusammen. Um die Abb. 97 nicht zu unübersichtlich zu machen, sind die Buchstaben A', D' und E' weggelassen, die ja an denselben Punkten stehen müßten, wo bereits die Buchstaben A, D und E eingezeichnet sind. Projiziert man nun diese Scheinfläche in der Richtung ihres kürzesten Achsenabschnittes OE auf die Oktaëderfläche ABC, so ist nach dem oben Gesagten die Anzahl Z der Valenzflächen (Sechsecke) auf der Scheinfläche $A'D'E'$ ebensogroß wie auf dem Flächenstücke AFC der Oktaëderfläche ABC, denn die Projektionen der Flächenstücke AFC und $A'D'E'$ auf die Würfelfläche AOB sind gleichgroß und zwar gleich ADO. Demnach ist die relative Valenzdichte q_c auf der Scheinfläche $A'D'E'$

$$q_c = \frac{Z}{\Delta\, ADE} : \frac{Z}{\Delta\, AFC} = \frac{\Delta\, AFC}{\Delta\, ADE}$$

Die Valenzdichte q_c hat hier den Index c, weil der kürzeste Achsenabschnitt der Scheinfläche $A'D'E'$ gleich c ist. Bezeichnet man die Flächenwinkel, welche die Flächenstücke ADE bzw. AFC mit der Würfelfläche AOB einschließen, mit α bzw. β, so ist

$$\Delta\, AFC = \frac{\Delta\, ADO}{\cos\beta} \text{ und}$$

$$\Delta\, ADE = \frac{\Delta\, ADO}{\cos\alpha}, \text{ also}$$

$$q_c = \frac{\cos\alpha}{\cos\beta}$$

Ferner ist $\cos\alpha = \overline{OG} / \overline{EG}$, und zwar ist hier $\overline{OG} = a\,b / \sqrt{a^2 + b^2}$ und $\overline{EG} = \sqrt{\overline{OG}^2 + c^2}$, woraus sich

$$\cos\alpha = \frac{1}{c\sqrt{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}}} \text{ ergibt.}$$

Der Winkel β ist die Hälfte des Oktaëderflächenwinkels, d. h. gleich $54^0\,44'$; also ist $\cos\beta = \frac{1}{\sqrt{3}}$

und $$q_c = \frac{\cos\alpha}{\cos\beta} = \frac{1}{c} \cdot \sqrt{\frac{3}{\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2}}} \quad \ldots\ldots\ldots (1)$$

Ist nicht c, sondern a oder b der kürzeste Achsenabschnitt, so steht in den zugehörigen Werten q_a und q_b vor dem Wurzelzeichen nicht $\frac{1}{c}$, sondern $\frac{1}{a}$ oder $\frac{1}{b}$. Geht man nun noch von den Achsenabschnitten a, b und c über zu den Indices h, k und l des Millerschen Flächensymbols $(h k l)$ der Scheinfläche $A'D'E'$, so erhält man die drei Formeln

$$\left.\begin{aligned} q_h &= h \cdot \sqrt{\frac{3}{h^2+k^2+l^2}} \\ q_k &= k \cdot \sqrt{\frac{3}{h^2+k^2+l^2}} \\ q_l &= l \cdot \sqrt{\frac{3}{h^2+k^2+l^2}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots . (2)$$

oder, wenn man $h^2 + k^2 + l^2 = n^2$ setzt,

$$\left.\begin{aligned} q_h &= \frac{h}{n} \cdot \sqrt{3} \\ q_k &= \frac{k}{n} \cdot \sqrt{3} \\ q_l &= \frac{l}{n} \cdot \sqrt{3} \end{aligned}\right\} \quad \ldots . (3)$$

Von diesen Formeln (2) oder (3) ist in jedem einzelnen Falle diejenige auszuwählen, in welcher der vor der Wurzel stehende Index der größte in dem Symbol $(h k l)$ der gerade vorliegenden Fläche ist.

Wie die Gleichung (1) zeigt, erreicht die relative Valenzdichte q_c ihren kleinsten Wert $q_c = 1$, wenn $a = b = c$ ist[1]), also auf der Oktaëderfläche. Ihr Maximum $\sqrt{3} = 1{,}73205$ erreicht q_c, wenn $a = b = \infty$ ist, d. i. auf der Würfelfläche. Zwischen diesen Grenzen 1 und $\sqrt{3}$ liegen die q-Werte aller übrigen Kristallflächen. Für die Rhombendodekaëderfläche $a:b:c = 1:\infty:1$ ergibt sich $q_c = \sqrt{\frac{3}{2}} = 1{,}22475$. Mutatis mutandis gilt dies natürlich auch für q_a und q_b.

Die Abb. 95 und 96, welche die Profile verschieden abgestufter Scheinflächen $(1\bar{1}3)$ und $(1\bar{1}4)$ darstellen, zeigen, daß es gleichgültig ist, ob man der Betrachtung die denkbar feinst gefurchte oder gröber abgestufte Scheinflächen zugrunde legt. Dasselbe gilt sinngemäß auch für die recht kompliziert gebauten Tetrakishexaëder- und Hexakisoktaëderscheinflächen, bei denen ja auch feinere und gröbere Abstufungen denkbar und möglich sind.

Von der vorliegenden Betrachtung sind solche Scheinflächen auszuschließen, die aus einem Oktaëdroid dadurch entstehen, daß man entgegen der oben angegebenen Abbauregel auch solche Zellmodelle entfernt, von denen bei richtig gewählter Projektionsrichtung in der Projektion nur ein Sechseck sichtbar ist. Demnach bleibt z. B. Ewalds „Oktaëderebene II" mit der relativen Valenzdichte 3 außer Betracht (vgl. hierzu die Beziehung des durch Abb. 68 dargestellten Modells zu dem nächst größeren, normalen Oktaëdroid der Abb. 69). In die Kategorie der hier nicht in Betracht zu ziehenden Scheinflächen gehören ferner Scheinflächen von der in Abb. 94 angedeuteten Art. Die hier abgebildete Scheinfläche $(1\bar{1}2)$ mit dem sehr komplizierten Profil 10, 20, 19, 9, 7, 27, 26, 16, 14, 34, 33, 23, 21 kann aus einem Modell mit dem denkbar einfachsten Profil 10, 7, 17, 14, 24, 21 nur dadurch hergestellt werden, daß man

[1]) Nach der Voraussetzung dürfen a und b hier nicht kleiner als c werden.

sich **nicht** an die oben besprochene Abbauregel hält. Damit geht aber die Möglichkeit verloren, das durch die Abb. 91 und 92 veranschaulichte Argument zu verwenden; darum gilt für solche Scheinflächen der Satz von S. 36 **nicht**. Scheinflächen von der in Abb. 68 und Abb. 94 dargestellten Art von der Betrachtung auszuschließen, ist man deswegen berechtigt, weil sie viel **mehr** Valenzflächen (Sechsecke) pro Flächeneinheit der Scheinfläche haben, als die vorher beschriebenen, einfacher gebauten Scheinflächen, die nach dem auf S. 35 angegebenen Abbauverfahren erhalten werden.[1]) Es ist ja klar, daß ein Krystall, sofern man ihn überhaupt zwingen kann, sich längs einer bestimmten Fläche zerreißen zu lassen oder sich zu spalten, längs derjenigen Scheinfläche zerreißen wird, auf der die **wenigsten** Valenzflächen (Sechsecke) pro Flächeneinheit liegen. Bei Beanspruchung einer Kette auf Zug reißt ja auch nicht das stärkste, sondern das schwächste Glied.

Zur räumlichen Darstellung der relativen Valenzdichte q in ihrer Abhängigkeit von der Lage der zugehörigen Scheinflächen denke man sich durch den Anfangspunkt eines rechtwinkeligen Koordinatensystems Ebenen gelegt, die allen möglichen Krystallflächen parallel sind. Auf jeder dieser Ebenen wird im Koordinatenanfangspunkt eine Senkrechte errichtet, deren Länge in einem passend gewählten Maßstabe gleich demjenigen Werte der relativen Valenzdichte q gemacht wird, der zu der betreffenden Krystallfläche gehört. Wird diese Operation in allen acht Oktanten durchgeführt, so bilden die Endpunkte dieser Senkrechten die „q-Fläche", deren Gestalt sich aus folgender Betrachtung ergibt.

Trägt man in Abb. 98 vom Koordinatenanfangspunkte O auf der x-, y- und z-Achse die Strecken $\overline{OH}$, $\overline{OK}$ und $\overline{OL}$ auf, deren Länge den Größen h, k und l proportional sind, so sind sie bekanntlich die Projektionen eines Lotes ON von der Länge $n=\sqrt{h^2+k^2+l^2}$, welches im Koordinatenanfangspunkte O auf der durch diesen Punkt O gelegten Ebene (hkl) errichtet ist. Diese Ebene ist in der Abb. 98 nicht eingezeichnet. Der Einfachheit halber soll auch hier wieder eine solche Fläche (hkl) ins Auge gefaßt werden, deren kürzester Achsenabschnitt auf der positiven Hälfte der z-Achse liegt. Auf das Lot ON, bzw. seine Verlängerung trägt man nun, entsprechend der oben angegebenen Vorschrift über die Erzeugung der q-Fläche, von O aus in einem beliebigen Maßstabe die der Größe q_l entsprechende Strecke

$$\overline{OQ}=q_l=\frac{l}{n}\sqrt{3} \quad \text{(vgl. Gl. 3)}$$

auf und projiziert $\overline{OQ}$ auf die drei Coordinatenachsen. Diese drei Projectionen x_Q, y_Q und z_Q sind dann

$$\left.\begin{aligned}\overline{OR}&=x_Q=\frac{h\cdot l}{n^2}\sqrt{3}\\ \overline{OS}&=y_Q=\frac{k\cdot l}{n^2}\sqrt{3}\\ \overline{OT}&=z_Q=\frac{l^2}{n^2}\sqrt{3}\end{aligned}\right\}\quad\ldots\ldots(4)$$

Zur Gleichung $x_Q^2+y_Q^2+z_Q^2=q_l^2$ addiert man rechts und links $-z_Q\cdot\sqrt{3}+\frac{3}{4}$ und erhält hierdurch

[1]) Abb. 94 zeigt, daß bei der Projektion der komplizierten Scheinfläche mit dem Profil 10, 20, 19, 9, 7, 27, 26, 16, 14. 34, 33, 23, 21 in der Richtung des kürzesten Achsenabschnittes, d. i. in der Richtung des Pfeiles P auf die x, y-Ebenen, diejenigen Sechsecke, die zwischen 16 und 14 liegen, alle diejenigen Sechsecke vollkommen verdecken müssen, die zwischen 16 und 26, sowie zwischen 26 und 27 liegen. Die Projektion würde also garnicht alle auf dieser komplizierten Scheinfläche liegenden Sechsecke zeigen können. Durch Wahl einer anderen Projektionsrichtung kann man diesen Übelstand in diesen und anderen, ähnlichen Fällen nicht beseitigen.

$$x_Q^2 + y_Q^2 + z_Q^2 - z_Q \cdot \sqrt{3} + \frac{3}{4} = q_l^2 - z_Q \sqrt{3} + \frac{3}{4}$$

Hieraus ergibt sich mit (3) und (4)

$$x_Q^2 + y_Q^2 + \left(z_Q - \frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = 3\frac{l^2}{n^2} - 3\frac{l^2}{n^2} + \frac{3}{4} = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 \quad \ldots . (5)$$

Diese Gleichung zeigt, daß die q-Werte durch ein Stück einer Kugeloberfläche dargestellt werden. Der Mittelpunkt dieser Kugel liegt auf der z-Achse bei $z = +\frac{\sqrt{3}}{2}$; der Kugelhalbmessser ist $\frac{\sqrt{3}}{2}$. Liegt der kürzeste Achsenabschnitt der Kristallflächen auf der negativen Hälfte der z-Achse oder auf der positiven oder negativen Hälfte der x- oder der y-Achse, so erhält man als zugehörige Stücke der q-Fläche Kugeloberflächenstücke von ganz analoger Lage. Die vollständige q-Fläche ist demnach aus Stücken von sechs Kugelflächen zusammengesetzt. Die Mittelpunkte der sechs gleich großen Kugeln liegen auf den drei Koordinatenachsen im Abstande $\pm\frac{\sqrt{3}}{2}$ vom Koordinatenanfangspunkt; der Halbmesser aller sechs Kugeln ist $\frac{\sqrt{3}}{2}$. Die Abb. 99 und 100 zeigen die Schnitte der vollständigen q-Fläche mit den durch den Koordinatenanfangspunkt parallel (001) und (110) gelegten Ebenen. K sind die oben erwähnten Minima ($q = 1$), H die Maxima ($q = \sqrt{3}$). Die mit R bezeichneten Punkte sind relative Maxima bzw. Minima $\left(q = \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$. Die punktierten Teile der Kugeloberfläche haben keine krystallographische Bedeutung, denn sie stellen solche q-Werte dar, die zwar nach den Gleichungen (3) berechnet sind, jedoch derart, daß der mit $\frac{\sqrt{3}}{n}$ zu multiplizierende Index (h oder k oder l) im Widerspruch mit der oben begründeten Forderung n i c h t der größte in dem zugehörigen Flächensymbol (hkl) ist. Die gestrichelten Geraden in den Abb. 99 und 100 sind die Schnittlinien der Bildebene mit einem vollkommen in der q-Fläche liegenden, regulären Oktaëder, das die q-Fläche an 26 Punkten von innen berührt, nämlich mit seinen 6 Ecken, seinen 12 Kantenmitten und den 8 Flächenmittelpunkten.

In derselben oder einer sehr ähnlichen Beziehung, in der der Widerstand des Diamanten gegen Spaltung oder Zerreißung zur relativen Valenzdichte q auf der Spaltungsfläche steht, steht offenbar der Dehnungscoëfficient zu der Größe $u = \frac{1}{q}$, für welche mit Rücksicht auf die Gleichungen (3) je nachdem ob der kürzeste Achsenabschnitt auf der x-, auf der y- oder auf der z-Achse liegt, einer der folgenden Werte zu setzen ist:

$$\left.\begin{aligned} u_h &= \frac{1}{q_h} = \frac{n}{h \cdot \sqrt{3}} \\ u_k &= \frac{1}{q_k} = \frac{n}{k \cdot \sqrt{3}} \\ u_l &= \frac{1}{q_l} = \frac{n}{l \cdot \sqrt{3}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots . (6)$$

Die Abhängigkeit dieser Funktion u von der räumlichen Lage der zugehörigen Krystallfläche kann man durch eine Fläche in derselben Weise zur Anschauung bringen, wie dies im vorhergehenden Abschnitt für die Funktion q beschrieben wurde. Über die sehr einfache Gestalt der u-Fläche gibt folgende Betrachtung Auskunft. Wir wählen auch hier zunächst als Beispiel eine Krystallfläche deren kürzester Achsenabschnitt auf der positiven Hälfte der

z-Achse liegt, für welche also $u_l = \frac{n}{l \cdot \sqrt{3}}$ ist. Genau so, wie es in der Abb. 98 mit der Größe q_l geschehen ist, wird hier auf das Lot ON, bzw. auf seine Verlängerung von O aus in einem beliebigen Maßstabe die der Größe u_l entsprechende Strecke $\overline{OU}$ aufgetragen und dann auf die drei Koordinatenachsen projiziert. Diese drei Projektionen sind dann

$$\left.\begin{aligned} x_U &= h \cdot \frac{u_l}{n} = \frac{h}{l \cdot \sqrt{3}} \\ y_U &= k \cdot \frac{u_l}{n} = \frac{k}{l \cdot \sqrt{3}} \\ z_U &= l \cdot \frac{u_l}{n} = \frac{1}{\sqrt{3}} \end{aligned}\right\} \quad \ldots\ldots (7)$$

Diese drei Gleichungen sagen aus: das Stück der u-Fläche, welches für diejenigen Krystallflächen gilt, deren kürzester Achsenabschnitt (c) auf der positiven Hälfte der z-Achse liegt, ist ein Stück einer senkrecht auf der z-Achse stehenden Ebene, die die z-Achse im Punkte $z = \frac{1}{\sqrt{3}}$ schneidet. Da die beiden anderen Achsenabschnitte a und b laut Voraussetzung hier größer als c oder mindestens gleich c sind, da ferner a und b sowohl auf der positiven, als auch auf der negativen Hälfte der x- bzw. der y-Achse liegen können, so sind hier die Grenzwerte sowohl von x_U als auch von y_U einerseits $+\frac{1}{\sqrt{3}}$ andererseits $-\frac{1}{\sqrt{3}}$. Analoge Resultate erhält man für den Fall, daß der kürzeste Achsenabschnitt der untersuchten Krystallfläche auf der negativen Hälfte der z-Achse oder auf der positiven oder negativen Hälfte der x- oder der y-Achse liegt. Die vollständige u-Fläche ist also die Oberfläche eines Würfels, dessen Mittelpunkt der Koordinatenanfangspunkt ist, und dessen Kanten den Koordinatenachsen parallel liegen. Der Abstand der Würfelflächen vom Würfelmittelpunkt ist $\frac{1}{\sqrt{3}}$, die halbe räumliche Würfeldiagonale gleich 1. Diejenigen Flächenstücke, die sich durch Verlängerung der Würfelflächen über die Kanten hinaus ergeben, haben ebensowenig eine krystallographische Bedeutung, wie die punktierten Kreisbögen in den Abb. 99 und 100, denn sie gehören zu u-Werten, bei denen, entgegen der Voraussetzung, der in den Gleichungen (6) im Nenner enthaltene Index (h, bzw. k, bzw. l) nicht der größte von allen, bzw. nicht einer der beiden gleich größten Indices ist.

Die von Voigt[1]) ermittelte „Oberfläche des Dehnungskoëfficienten“ des Flußspats, Steinsalzes, Sylvins und Pyrits zeigt mit der hier beschriebenen u-Fläche in einigen wesentlichen Eigenschaften Ähnlichkeit; jedoch sind auch charakteristische Unterschiede vorhanden.

Zusammenfassung.

1. Einige einfache Projektionen des Diamantraumgitters auf (100), (110) und (111) werden beschrieben.

2. Die Achsen und Ebenen der einfachen und der zusammengesetzten Symmetrie werden hinsichtlich der Lage ihrer Schnittpunkte im Diamantraumgitter untersucht und nach diesem Gesichtspunkte in zwei Gruppen zusammengefaßt, nämlich in die der hexakistetraëdrischen und in die der ditrigonal-skalenoëdrischen Klasse.

---

[1]) Vgl. Groth, physikalische Krystallographie, 4. Aufl. [1905], S. 220—221.

3. Gestalt, Größe und Lage des Atombereichs (Zellmodells) werden untersucht. Die Zentren, Achsen und Ebenen der Symmetrie werden angegeben, die die Ecken, Kanten und Flächen des Atombereichs bilden.

4. Kleine Diamantkrystallmodelle werden aus Zellmodellen aufgebaut, und zwar Tetraëder, Oktaëder, Rhombendodekaëder, Würfel, Kombinationen derselben usw. Alle diese Krystallmodelle werden durch äquidistante Trennungsfugen parallel zu den Oktaëderflächen in gleichdicke Schichten zerlegt, wodurch die Spaltbarkeit des Diamanten zum Ausdruck kommt. Die Diskussion der am Diamanten möglichen Haüyschen Decrescenzen gibt eine einfache Erklärung dafür, daß als ebene Kristallflächen die Oktaëderfläche sehr häufig, die einfachst gebauten, den Oktaëderkanten parallel liegenden Decrescenzen (Würfel-, Rhombendodekaëder-, Ikositetraëder- und Triakisoktaëderflächen) aber viel seltener vorkommen, und die sehr kompliziert gebauten, den Oktaëderkanten nicht parallelen Decrescenzen der Hexakisoktaëderflächen nie als ebene, sondern immer nur in Gestalt krummer Flächen. Die Struktur der Spinellzwillinge und der Kerbkanter läßt erkennen, daß nur die Oktaëderfläche, aber nicht die Würfelfläche Zwillingsebene ist. Die weitgehende Übereinstimmung der Krystallmodelle mit den Diamantkrystallen zeigt sich auch in der Musterung und Streifung der verschiedenen Krystallflächen. Die Modelle zeigen ferner den Grund, warum die Merkmale der tetraëdrischen Hemiëdrie, die den kleinen Krystallmodellen notwendig anhaften bei zunehmender Größe der Krystalle verschwinden können und tatsächlich auch meistens verschwinden. Man kann also die morphologischen Merkmale der Wachstumsformen des Diamanten aus dem Diamantraumgitter und dem Raumzellmodell, deduzieren.

5. Aus der Gestalt der Oberflächen der aus Zellmodellen aufgebauten Diamantkrystallmodelle wird ein einfacher mathematischer Ausdruck für die relative Flächendichte derjenigen Valenzen abgeleitet, die gedehnt bzw. zerrissen werden müssen, wenn man den Diamanten senkrecht zu einer beliebigen Fläche auf Zug beansprucht, bzw. ihn parallel zu dieser Fläche spaltet oder zerreißt.

Den Schluß dieser Arbeit mögen einige Danksagungen bilden, die mir sehr am Herzen liegen. Die vorliegende Untersuchung ging aus mündlichen Besprechungen mit Herrn Geheimrat E. A. Wülfing hervor, die an meine hier mehrmals erwähnte Arbeit über die Baeyersche Spannungstheorie und die Struktur des Diamanten anknüpften und zunächst nur der Diskussion der Symmetrie des Diamantraumgitters galten. Herrn Geheimrat E. A. Wülfing verdanke ich außer der Unterstützung mit den Hilfsmitteln seines Instituts die Ermutigung zu dieser Arbeit und seinen stets freundlichst gewährten Rat, der mir den Weg in dieses vom Felde meiner früheren Tätigkeit etwas weit entfernt liegende Gebiet wies. Die Veröffentlichung dieser Arbeit wurde erst durch zwei hochherzige Spenden ermöglicht, deren eine mir von Herrn Prof. Dr. S. Hoogewerff im Haag, die andere von der Notgemeinschaft der Deutschen Wissenschaft zur Verfügung gestellt wurde. Allen Förderern meiner Arbeit hier nochmals meinen ergebensten Dank auszusprechen, ist mir eine angenehme Pflicht.

Verzeichnis der Abbildungen.

Seite

Abb. 1. Diamantraumgitter 3
Abb. 2. Grundriß des Diamantraumgitters . . 3
Abb. 3. Elementarwürfel 3
Abb. 4. Grundriß des Diamantraumgitters . . 4
Abb. 5—10. VAN 'T HOFFsche Tetraëder . . 4—5
Abb. 11. Projektion des Diamantraumgitters auf (111) 6
Abb. 12. Projektion des Diamantraumgitters auf (1$\bar{1}$0) 6
Abb. 13. Projektion des Diamantraumgitters auf (001) 7
Abb. 14. Projektion des Diamantraumgitters auf (110) 7
Abb. 15. Projektion des Diamantraumgitters auf (111) 7
Abb. 16. Projektion des Diamantraumgitters auf (001), (100) und (010) 8
Abb. 17. Elementarwürfel 9
Abb. 18. Raumgitter der *H*- und der *I*-Punkte . . . . 10 u. 12
Abb. 19. Zentriertes, reguläres Tetraëder . . . 11
Abb. 20. Lage der Symmetriezentren 11
Abb. 21. Lage der *H*- und der *I*-Punkte . . . 11
Abb. 22. Lage der *H*- und der *I*-Punkte in einem kleinen Diamantoktaëdroid 12
Abb. 23. Lage de ditrigonal-skalenoëdrischen Symmetrieelemente 12
Abb. 24. Symmetrie begrenzter Diamantraumgitterausschnitte 13
Abb. 25. Diamantraumgitterausschnitt zu den Betrachtungen über die Lage benachbarter Zellmodelle 14
Abb. 26. Tetraëdrisch-rhombendodekaëdrisches Zellmodell. 14
Abb. 27. Schnittparallel (110) durch das Zellmodell von Abb. 26 14
Abb. 28. Ditetraëdrisches Zellmodell 17
Abb. 29—31. Projektionen des VAN 'T HOFFschen Tetraëders, des tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen und des ditetraëdrischen Zellmodells auf (100) . . 14 u. 17

Seite

Abb. 32. Lage der Symmetrieelemente in und auf dem Zellmodell 14
Abb. 33. Elementarwürfel, aufgebaut aus Zellmodellen 18
Abb. 34—36. Abbildungen eines Oktaëdroidmodells 19
Abb. 37. Modell eines Tetraëdroids 19
Abb. 38 u. 39. Stücke eines aus tetraëdrisch-rhombendodekaëdrischen Zellmodellen aufgebauten Tetraëdroids . . , . 20
Abb. 40. Tetraëdroid, aufgebaut aus KEKULÉschen Atommodellen 20
Abb. 41. Projektion eines Tetraëdroids auf eine Tetraëderfläche 21
Abb. 42. Modell eines Tetraëdroids 21
Abb. 43. (111) mit 3 dreieckigen Wachstumsgrübchen 23
Abb. 44. (111) mit einem sechseckigen Wachstumsgrübchen 23
Abb. 45—48. Lage der Spaltflächen (zu den Betrachtungen über die HAUYschen Decrescenzen) . . . . 23—24
Abb. 49—50. HAUYsche Decrescenzen . 24—25
Abb. 51—52. {111} + (1$\bar{1}$3) 27
Abb. 53. {111} + (1$\bar{1}$2) 27
Abb. 54. {331} + (313) + (133) 27
Abb. 55—56. {111} + (213) 28
Abb. 57. Zellmodellkomplex 28
Abb. 58. {111} + (213), schematisiert 29
Abb. 59. {110} 29
Abb. 60. {110}, schematisiert 29
Abb. 61. {110} nach ROSE und SADEBECK . . 29
Abb. 62. {110} nach v. FERSMANN und GOLDSCHMIDT 29
Abb. 63. {110}, schematisiert 30
Abb. 64. Kerbkanter 30
Abb. 65—66. Aus Zellmodellen aufgebauter Kerbkanter 30
Abb. 67. Oktaëdroid 30

Seite

Abb. 68 Übergang vom Oktaëdroid zum Kerbkanter 30

Abb. 69. Oktaëdroid 30

Abb. 70—71. {100} 31

Abb. 72—73. Skulptur der Würfelfläche nach v. Fersmann und Goldschmidt . . . 31

Abb. 74. {100} + {110} + {111} 31

Abb. 75. {100} + {110} + {111}, schematisiert . 31

Abb. 76. {100} + {110} + {111} nach v. Fersmann und Goldschmidt 31

Abb. 77. Zwei invers zueinanderstehende Zellmodelle 31

Abb. 78. Zwei spiegelbildlich zueinanderstehende Zellmodelle 31

Abb. 79. Spinellzwilling (Nahtstein) 32

Abb. 80. Spinellzwilling 32

Abb. 81. Spinellfünfling 33

Seite

Abb. 82. Spinellsechsling nach v. Fersmann und Goldschmidt 33

Abb. 83. Spinellfünfling, aus Kekulé schen Atommodellen aufgebaut 33

Abb. 84—85. Ditrigonal-skalenoëdrische Krystallmodelle . . . . 33—34

Abb. 86—90. Erzeugung der Fläche ($1\bar{1}3$) an einem Oktaëdroid, projiziert auf (001) 35

Abb. 91—92. Erläuterungen zu Abb. 86—90 . 35

Abb. 93. {111} + ($1\bar{1}3$), projiziert auf (100) . . 35

Abb. 94. Profile der Scheinfläche ($1\bar{1}2$) . . . 37

Abb. 95. Profile der Scheinfläche ($1\bar{1}3$) . . . 37

Abb. 96. Profile der Scheinfläche ($1\bar{1}4$) . . . 37

Abb. 97. Abbildungen zu den Betrachtungen über die relative Valenzdichte . . . 36

Abb. 98—100. Dasselbe . . . . 38—39

Tafel I.

Abb. 1—10 u. 13—15 (S. 3—5 u. 7).
Abb. 11 u. 12 s. Tafel II.

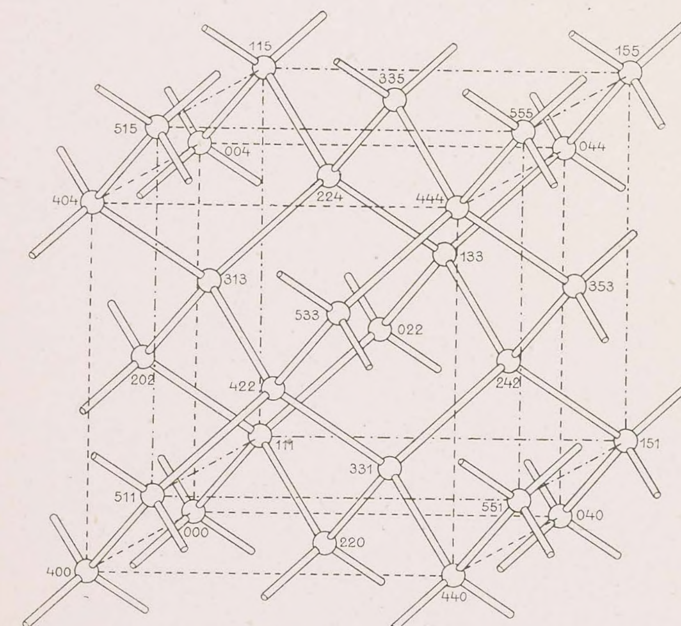


Abb. 1 (S. 3).

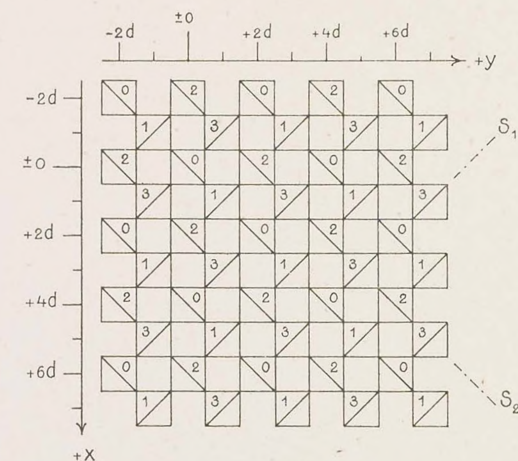


Abb. 4 (S. 4).

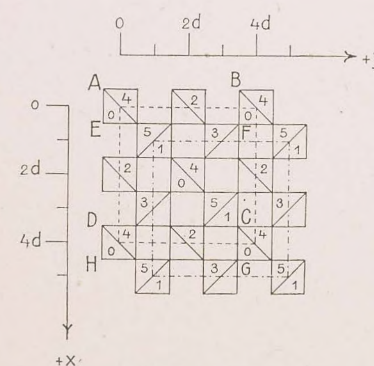


Abb. 2 (S. 3)

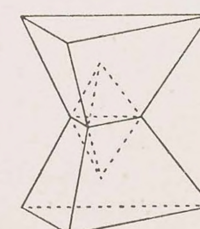


Abb. 5 (S. 4).

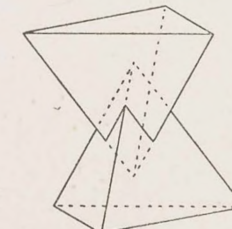


Abb. 6 (S. 4).

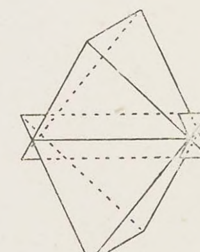


Abb. 7 (S. 4).

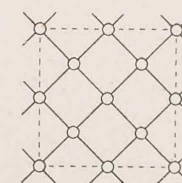


Abb. 13 (S. 7).

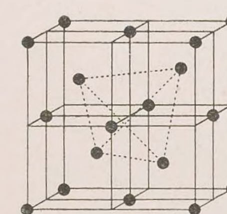


Abb. 3 (S. 3).

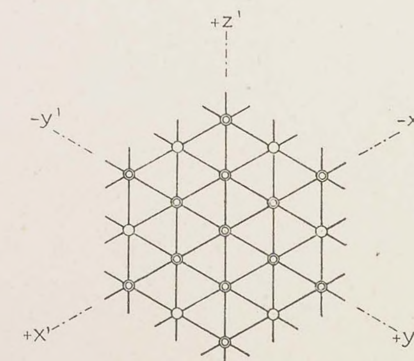


Abb. 15 (S. 7).

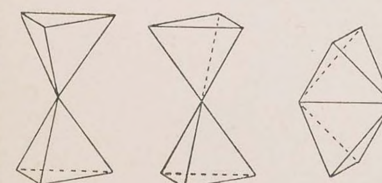


Abb. 8 Abb. 9 Abb. 10
(S. 5).

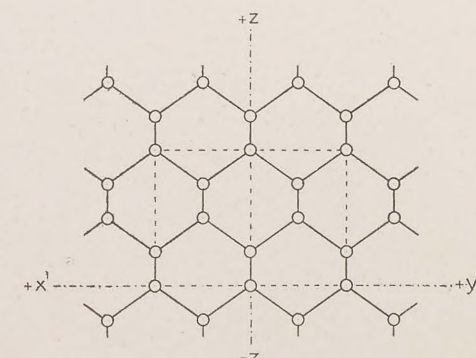


Abb. 14 (S. 7).

Tafel II.

Abb. 11–12 u. 16–18 (S. 6, 8–10 u. 12).

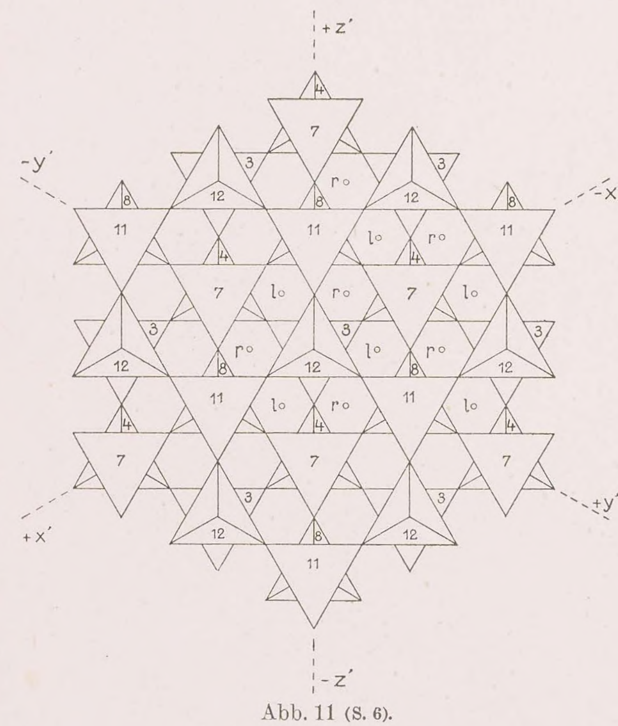


Abb. 11 (S. 6).

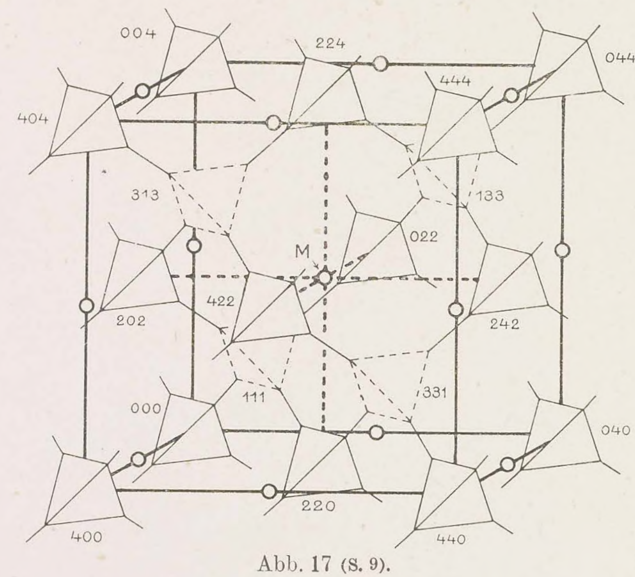


Abb. 17 (S. 9).

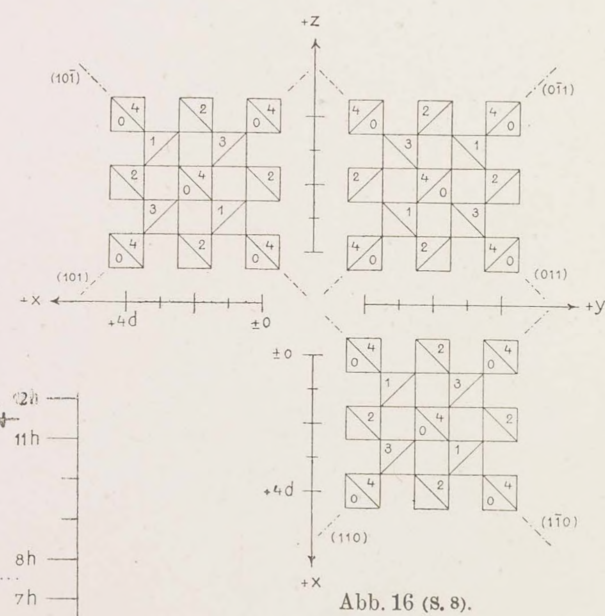


Abb. 16 (S. 8).

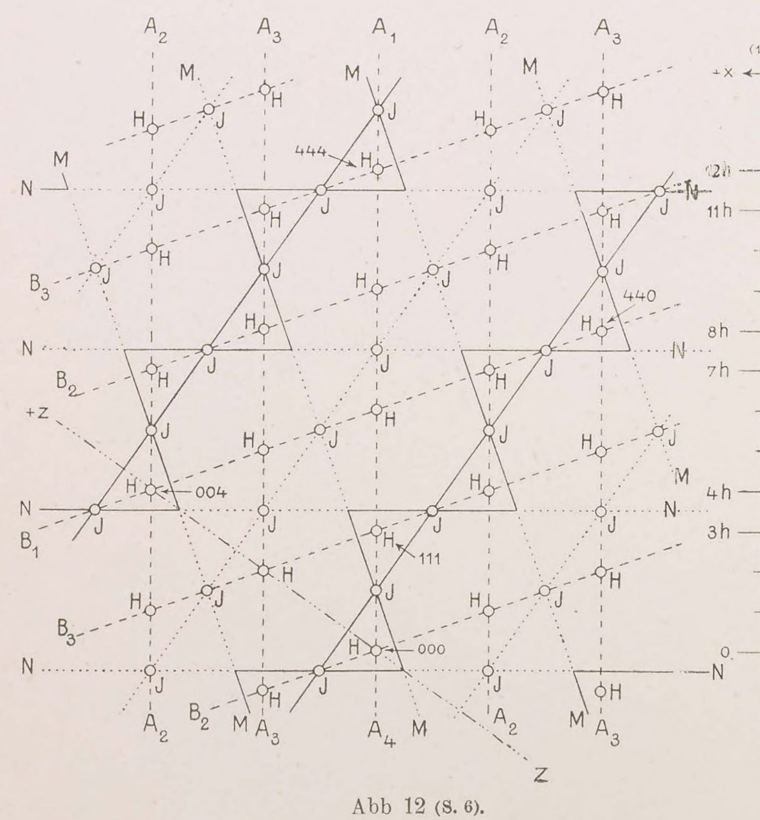


Abb 12 (S. 6).

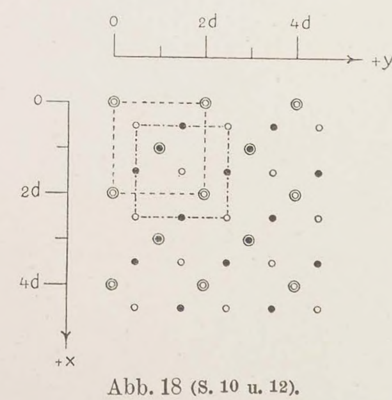


Abb. 18 (S. 10 u. 12).

Tafel III.

Abb. 19—33 (S. 11—18).

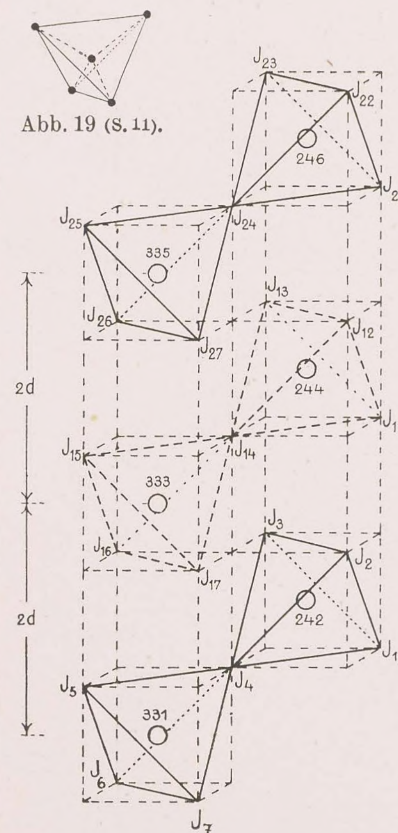


Abb. 19 (S. 11).

Abb. 21 (S. 11).

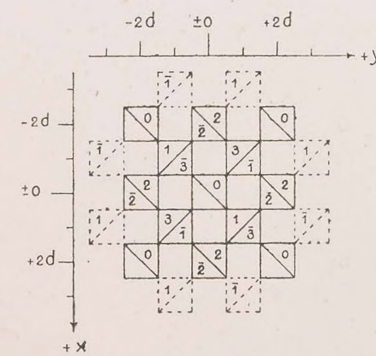


Abb. 25 (S. 14).

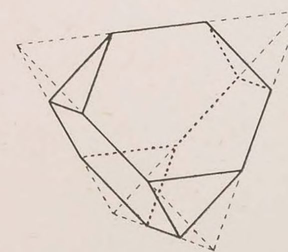


Abb. 28 (S. 17).

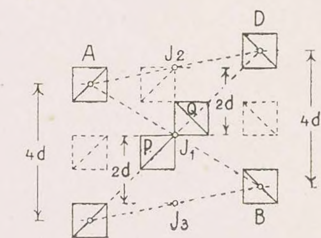


Abb. 20 (S. 11).

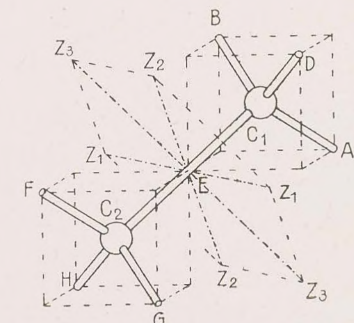


Abb. 23 (S. 12).

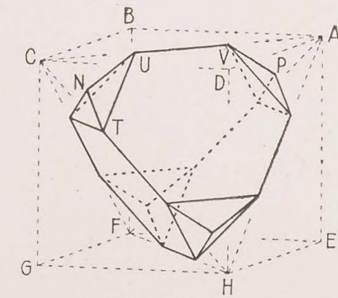


Abb. 26 (S. 14).

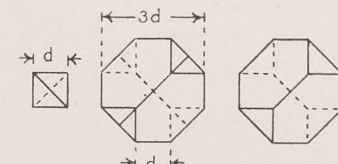


Abb. 29 (S. 14). Abb. 30 (S. 14). Abb. 31 (S. 17).

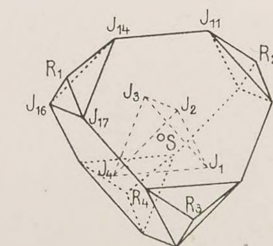


Abb. 32 (S. 14).

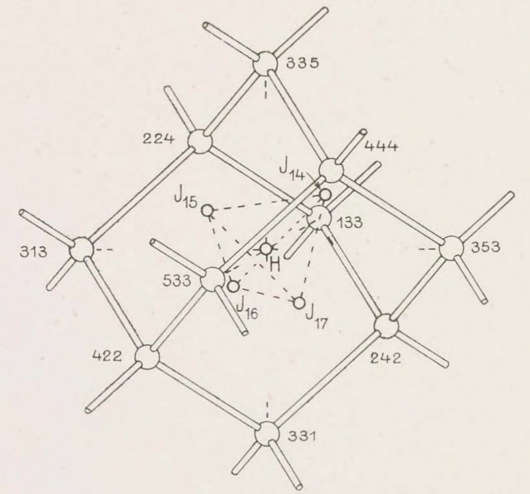


Abb. 22 (S. 12).

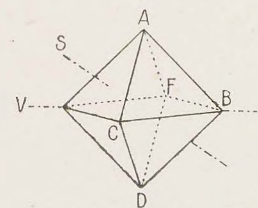


Abb. 24 (S. 13).

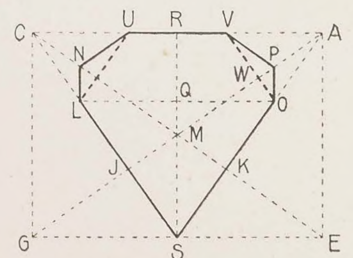
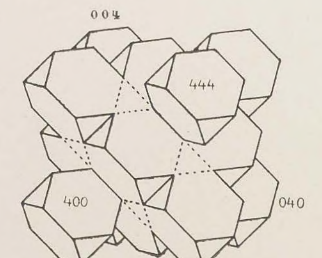


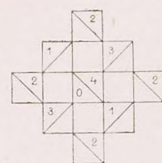
Abb. 27 (S. 14).

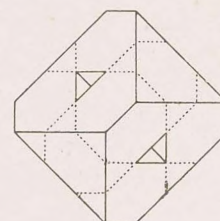


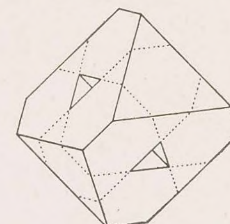
(Abb. 33 (S. 18).

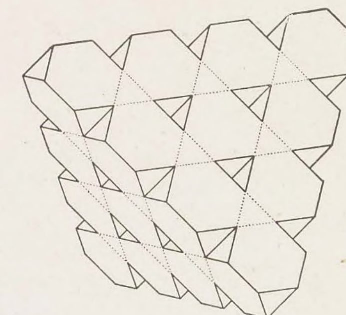
Tafel IV.

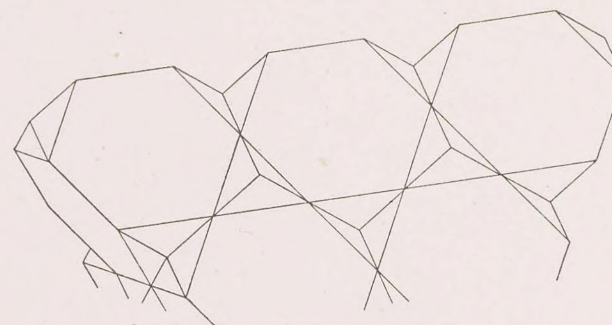
Abb. 34 – 44 (S. 19 – 23).

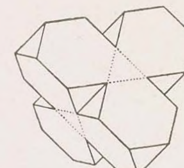

Abb. 34 (S. 19).


Abb. 35 (S. 19).


Abb. 36 (S. 19).


Abb. 37 (S. 19).


Abb. 38 (S. 20).


Abb. 42 (S. 21).

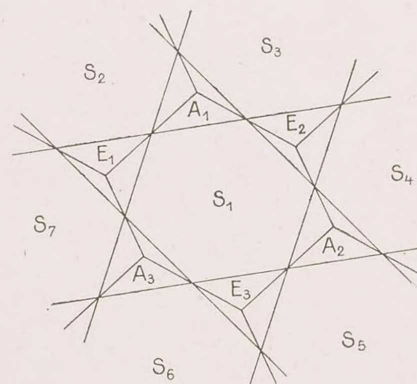
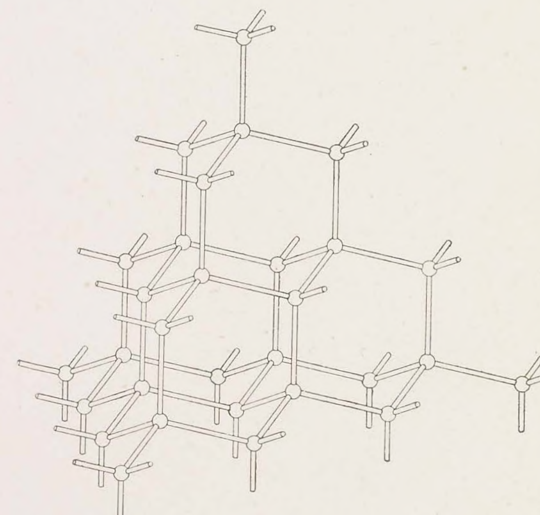


Abb. 39 (S. 20).


Abb. 40 (S. 20).

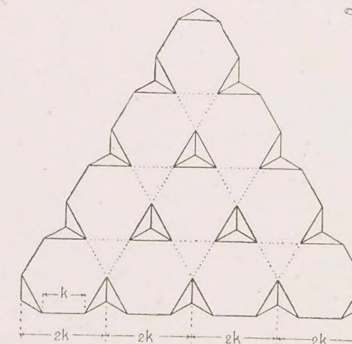
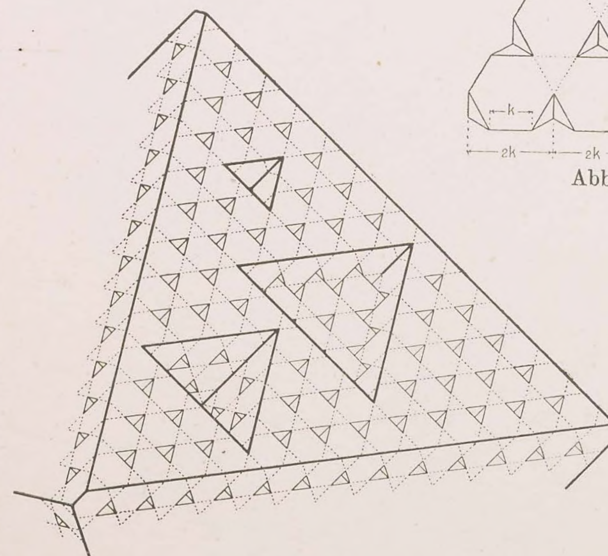
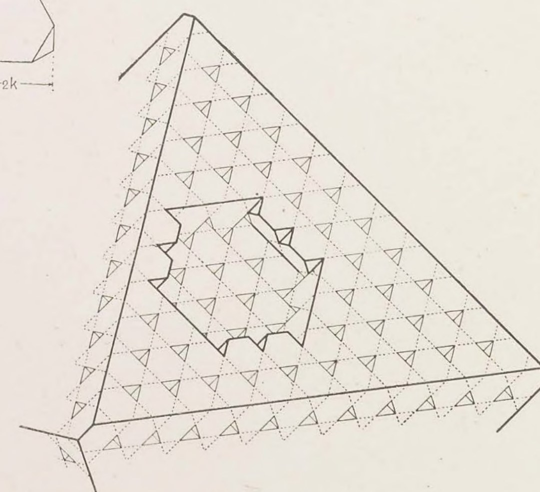


Abb. 41 (S. 21).


Abb. 43 (S. 23).


Abb. 44 (S. 23).

Tafel V.

Abb. 45 – 52 (S. 23—27).

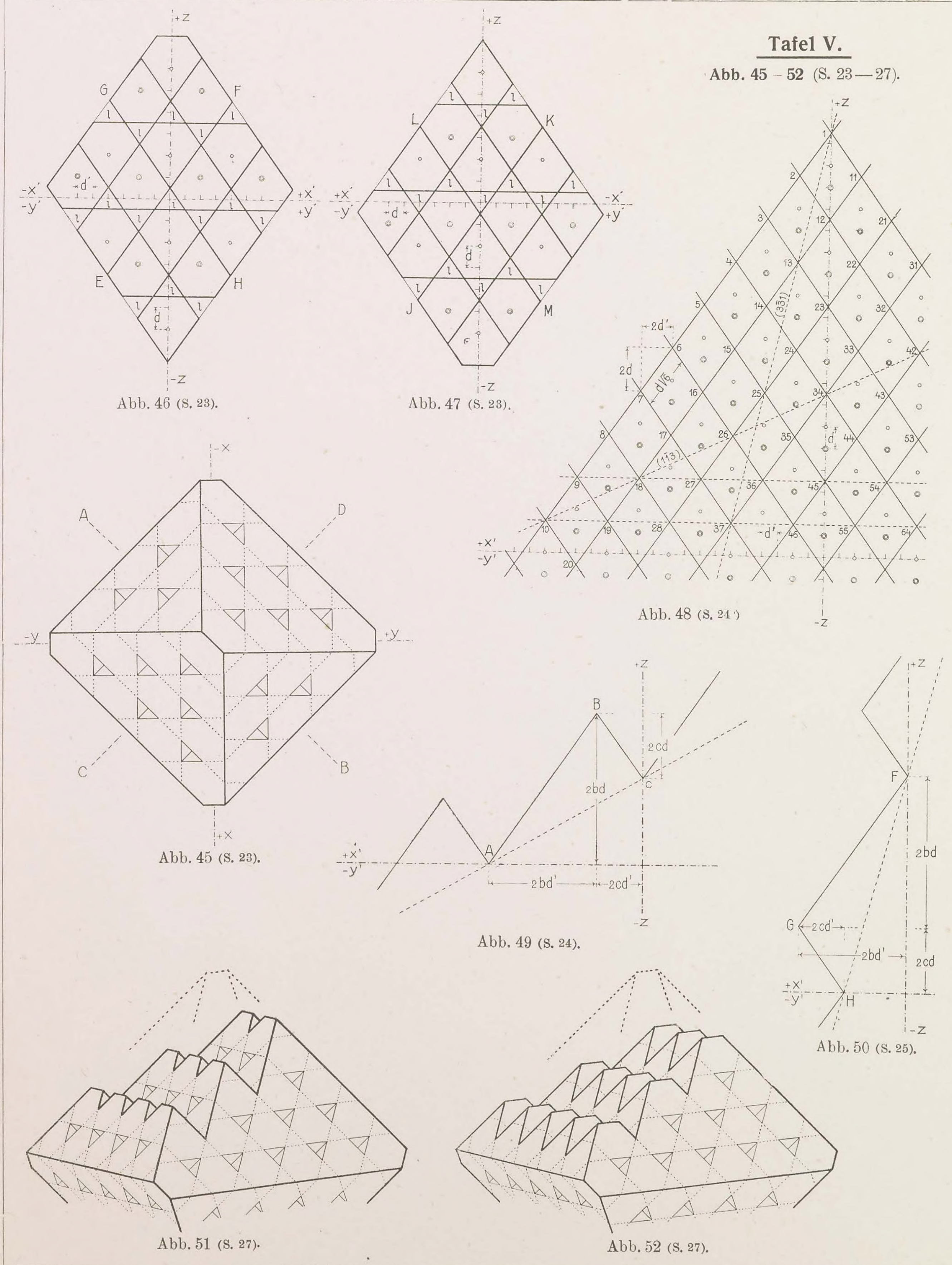


Abb. 46 (S. 23).

Abb. 47 (S. 23).

Abb. 48 (S. 24).

Abb. 45 (S. 23).

Abb. 49 (S. 24).

Abb. 50 (S. 25).

Abb. 51 (S. 27).

Abb. 52 (S. 27).

Tafel VI.

Abb. 53—61
(S. 27—29).

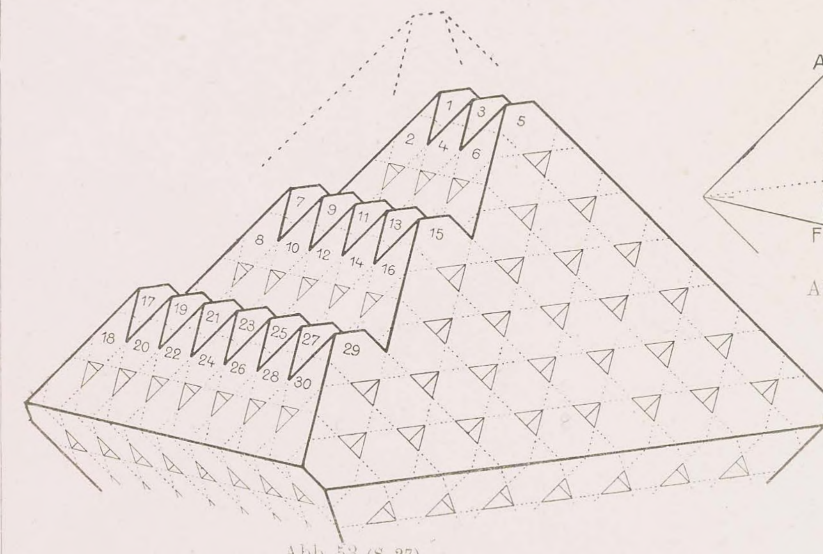


Abb. 53 (S. 27).

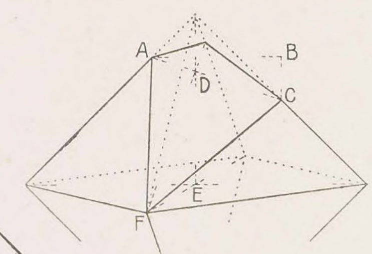


Abb. 56 (S. 28).

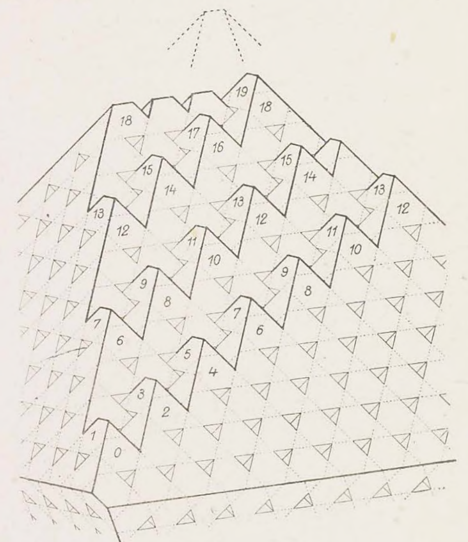


Abb. 55 (S. 28).

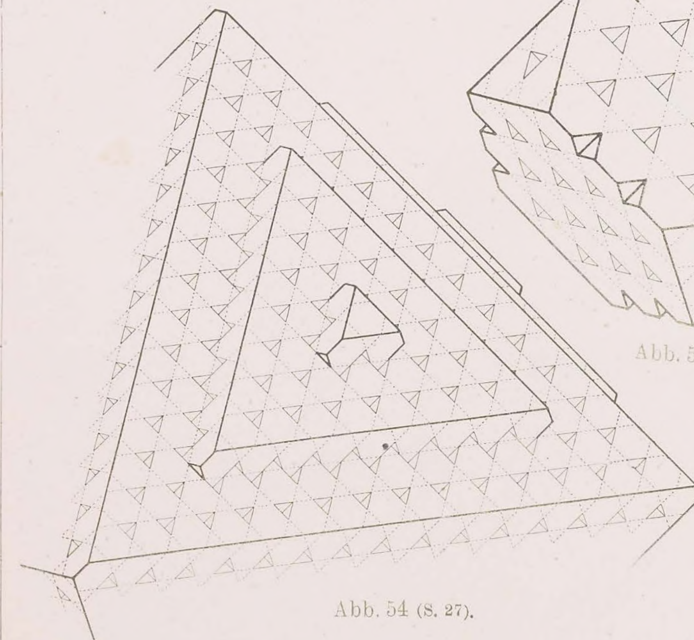


Abb. 54 (S. 27).

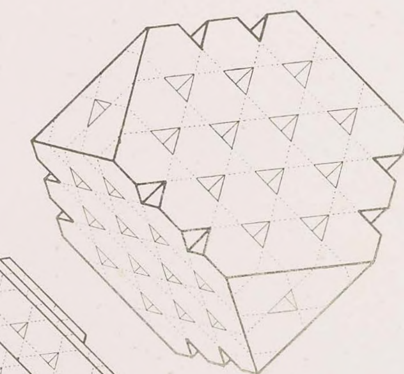


Abb. 57 (S. 28).

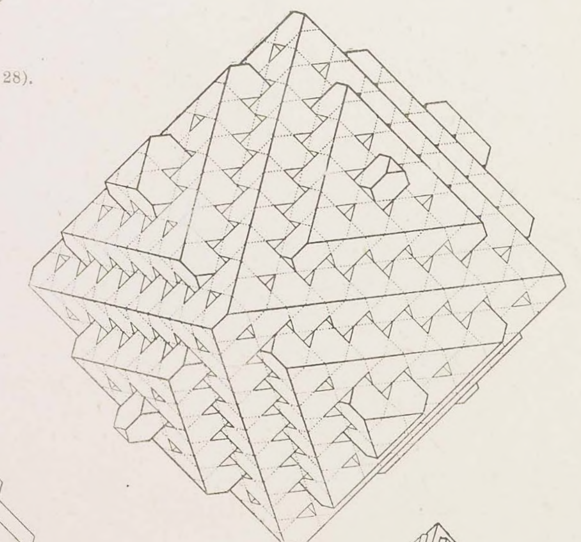


Abb. 59 (S. 29).

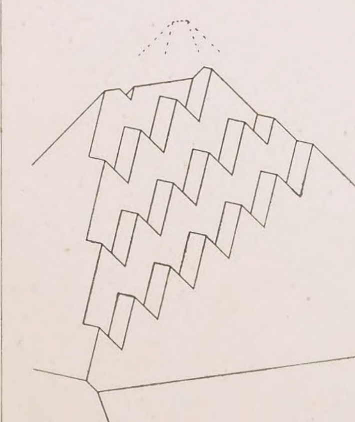


Abb. 58 (S. 29).

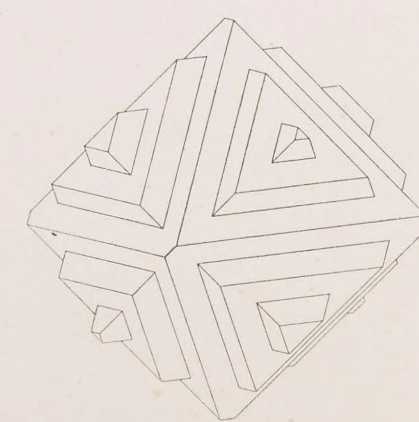


Abb. 60 (S. 29).

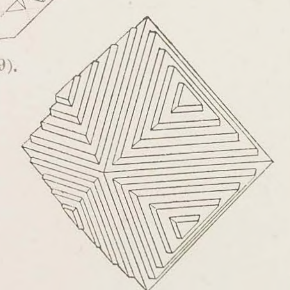


Abb. 61 (S. 29).

Tafel VII.

Abb. 62 – 69 u. 72 – 73 (S. 29—31).
Abb. 70 u. 71 s. Tafel VIII.

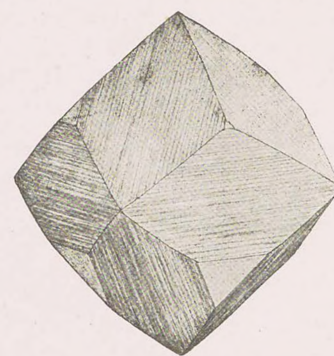


Abb. 62 (S. 29).

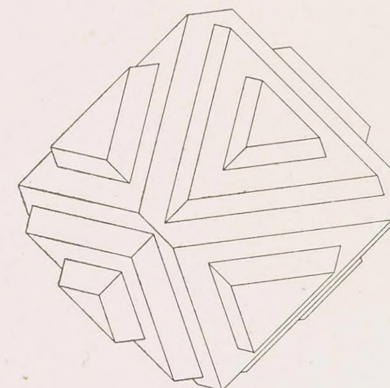


Abb. 63 (S. 30).

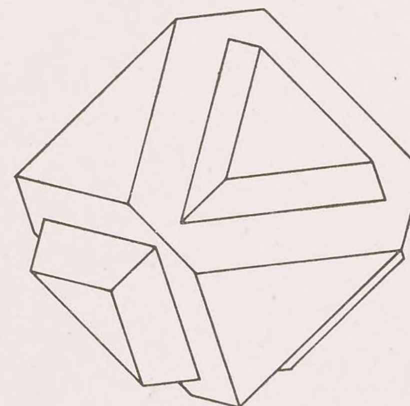


Abb. 64 (S. 30).

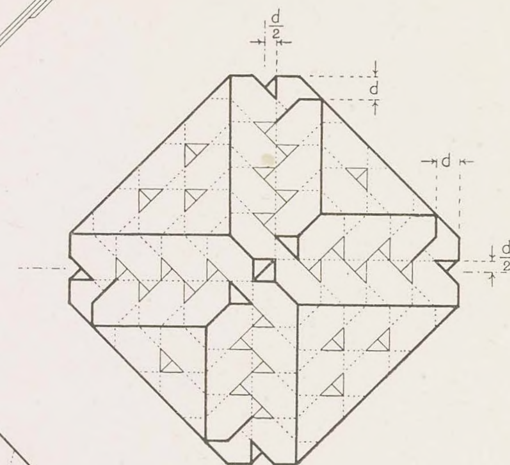


Abb. 65 (S. 30).

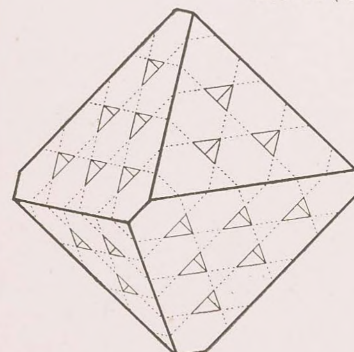


Abb. 67 (S. 30).

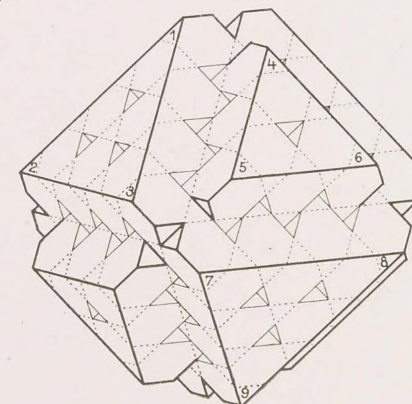


Abb. 66 (S. 30).

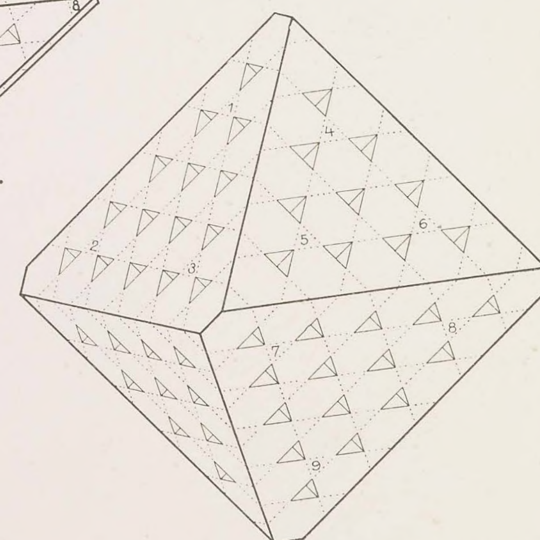


Abb. 69 (S. 30).

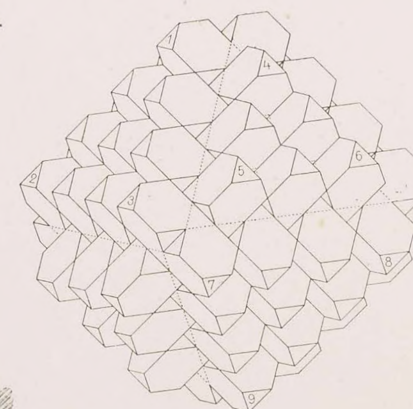


Abb. 68 (S. 30).

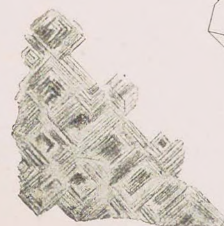


Abb. 72 (S. 31).



Abb. 73 (S. 31).

Tafel VIII.

Abb. 70—71 u. 74—85
(S. 31—34).

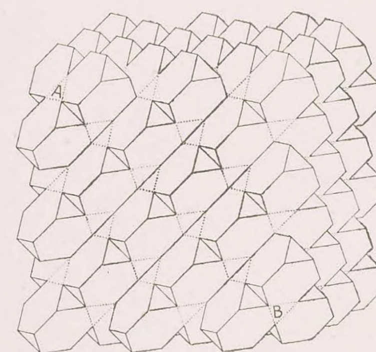


Abb. 70 (S. 31).

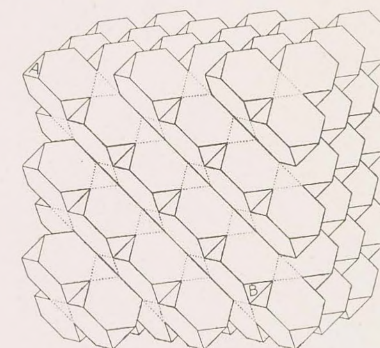
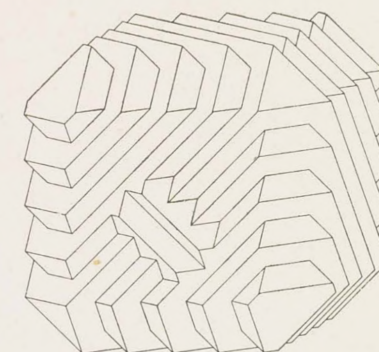


Abb. 71 (S. 31).


Abb. 75 (S. 31).

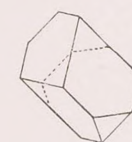
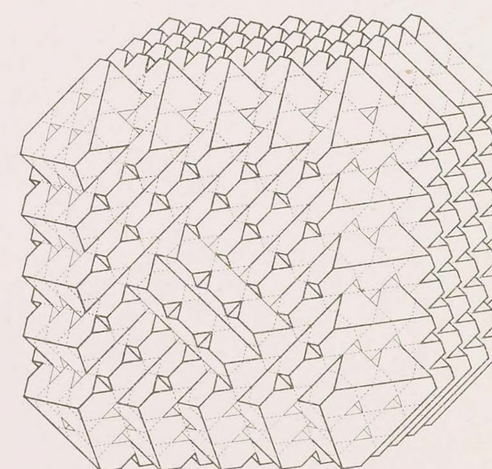
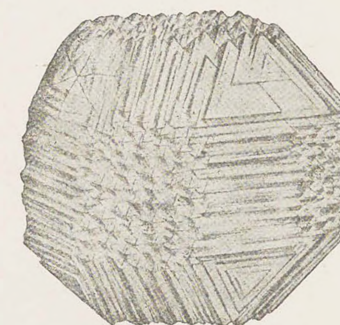
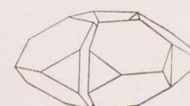
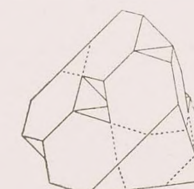

Abb. 77 (S. 31).

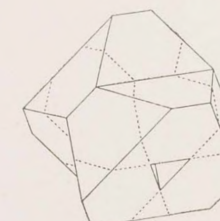

Abb. 78 (S. 31).

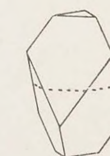

Abb. 74 (S. 31).

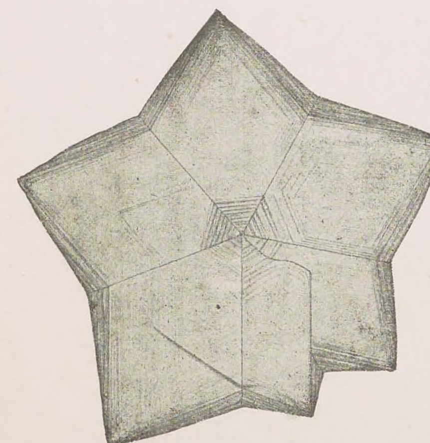

Abb. 76 (S. 31).

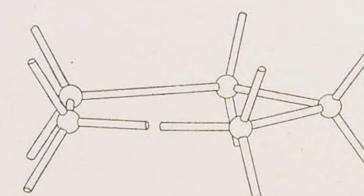

Abb. 81 (S. 33).

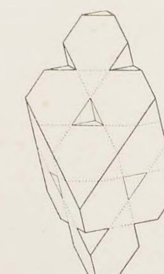

Abb. 79 (S. 32).

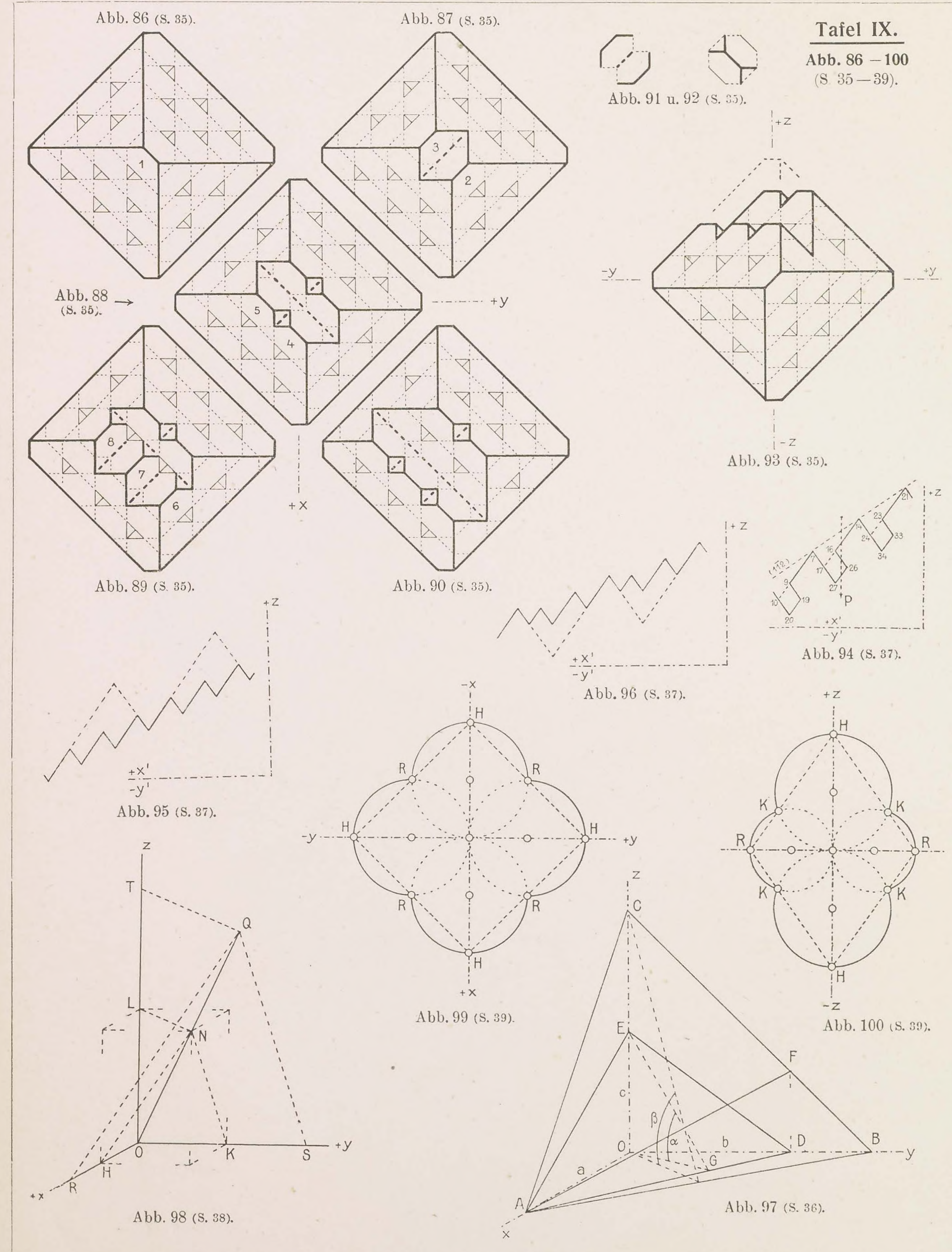

Abb. 80 (S. 32).


Abb. 84 (S. 34).


Abb. 82. (S. 33.)


Abb. 83 (S. 33).


Abb. 85 (S. 34).


Tafel IX.
Abb. 86 – 100
(S. 35—39).
Abb. 86 (S. 35).
Abb. 87 (S. 35).
Abb. 91 u. 92 (S. 35).
Abb. 88
(S. 35).
Abb. 93 (S. 35).
Abb. 89 (S. 35).
Abb. 90 (S. 35).
Abb. 94 (S. 37).
Abb. 96 (S. 37).
Abb. 95 (S. 37).
Abb. 99 (S. 39).
Abb. 100 (S. 39).
Abb. 98 (S. 38).
Abb. 97 (S. 36).

Veröffentlichungen der Heidelberger Akademie der Wissenschaften

(Stiftung Heinrich Lanz)

Mathematisch-naturwissenschaftliche Klasse.

**Im Verlag von Carl Winters Universitätsbuchhandlung in Heidelberg sind bisher erschienen:*

Abhandlungen. 4°.

1. 1910. Wasielewski, Th. v., und L. Hirschfeld. Untersuchungen über Kulturamöben. Mit 4 Tafeln.
2. 1913. Osann, A. Petrochemische Untersuchungen. I. Teil. Mit 8 Tafeln. M. 10.—.
3. 1914. Klebs, Georg. Über das Treiben der einheimischen Bäume speziell der Buche. Mit 20 Textfiguren.
4. 1918. Petersen, Hans. Bänderkinematik. Versuch einer Theorie der Bandverbände. Mit einem Atlas von 37 Tafeln.
5. 1918. Lenard, P. Quantitatives über Kathodenstrahlen aller Geschwindigkeiten. Mit 7 Kurventafeln und 4 Textabbildungen. Zur Zeit vergriffen.
6. 1918. Wülfing, E. A. Ein neues Polarisationsmikroskop. Mit 2 Tafeln und 32 Textfiguren.
7. 1919. Herbst, Kurt. Beiträge zur Entwicklungsphysiologie der Färbung und Zeichnung der Tiere. I. Der Einfluß gelber, weißer und schwarzer Umgebung auf die Zeichnung von Salamandra maculosa.
8. 1919. Osann, A. Der chemische Faktor in einer natürlichen Klassifikation der Eruptivgesteine. I. Mit 5 Tafeln.
9. 1920. Osann, A. Der chemische Faktor in einer natürlichen Klassifikation der Eruptivgesteine. II. Mitteilung.

Im Verlag von Walter de Gruyter & Co., Berlin, erschienen:

10. 1922. Stäckel, P., und Weinreich, W. Die Darstellung gerader Zahlen als Differenzen und Summen von Primzahlen.
11. 1922. Fürbringer, Max. Das Zungenbein der Wirbeltiere insbesondere der Reptilien und Vögel. Nachgelassene Untersuchungen über systematische Phylogenie mit besonderer Berücksichtigung der Wurzel der Säugetiere.
12. 1924. Mohr, Ernst. Über den Zusammenhang zwischen der Struktur und den morphologischen Merkmalen des Diamanten. Mit 9 Tafeln.

Sitzungsberichte. Gr.-8°.

Abteilung A. Mathematisch-physikalische Wissenschaften.

Jahrgang 1921.

1. Franzen, H. Über die chemischen Bestandteile grüner Pflanzen. 12. Mitteilung: Über die flüchtigen Bestandteile der Eichenblätter.
2. Königsberger, L. Über partielle Differentialgleichungen erster Ordnung.
3. Heffter, L., und W. Stollwenwerk. Über Scharen gleichberechtigter Koordinatensysteme. Mit 3 Textabbildungen.
4. Perron, Oskar. Über die Approximation irrationaler Zahlen durch rationale. I.
5. Liebmann, Heinrich. Der geometrische Aufbau der Bäcklundschen Transformation.
6. Eisenhut, O. Über Kathodenstrahlintensitätsmessung durch feste Kondensatoren.

(Fortsetzung der erschienenen Sitzungsberichte siehe 4. Umschlagseite.)

PREISE WERDEN AUF ANFRAGE MITGETEILT.

* Bestellungen auf solche Veröffentlichungen der math.-naturw. Klasse, welche früher im Verlag von Carl Winters Universitätsbuchhandlung in Heidelberg erschienen sind, nimmt auch der Verlag Walter de Gruyter & Co., Berlin, entgegen.

58

7. Königsberger, Leo. Über vollständige Integrale partieller Differentialgleichungen erster Ordnung.
8. Perron, Oskar. Über die Approximation irrationaler Zahlen durch rationale. II.
9. Liebmann, Heinrich. Flächen mit einer vorgeschriebenen Schar geodätischer Parallelkurven.
10. Baldus, Richard. Über die Flächen, welche die Strahlen eines Bündels unter festem Winkel schneiden.
11. Königsberger, Leo. Die Erweiterung des Helmholtzschen Princips von der verborgenen Bewegung und den unvollständigen Problemen auf kinetische Potentiale beliebiger Ordnung.

Abteilung B. Biologische Wissenschaften.

Jahrgang 1921.

1. Kossel, A. Über die Beziehungen der Biochemie zu den morphologischen Wissenschaften.

Im Verlag von Walter de Gruyter & Co., Berlin, erschienen:

Abteilung A. Mathematisch-physikalische Wissenschaften.

Jahrgang 1922.

1. Perron, Oskar. Neue Summationsmethoden und Entwicklungen nach Polynomen. Goldmark 0·3
2. Perron, Oskar. Über transzendente Funktionen auf Riemannschen Flächen. Goldmark 0·6
3. Baldus, Richard. Über die singulären Punkte reeller Parameterkurven. Goldmark 0·5

Jahrgang 1923.

1. Deecke, W. Mitteleuropäische Meeresströmungen der Vorzeit. Goldmark 0·6
2. Liebmann, Heinrich. Die Lie'sche Cyklide und die Inversionskrümmung. Goldmark 0·4
3. Perron, Oskar. Über Gleichungen ohne Affekt. Goldmark 0·4
4. Liebnann, Heinrich. Beiträge zur Inversionsgeometrie III. Goldmark 0·4
5. Kratzert, J. Beitrag zur Kenntnis des Andesins von Bodenmais. Goldmark 0·5

Jahrgang 1924.

1. Th. Curtius und A. Bertho. Einwirkung von Stickstoffkohlenoxyd und von Stickwasserstoffsäure unter Druck auf aromatische Kohlenwasserstoffe. Goldmark 0·5
2. Liebmann, Heinrich. Umkehrung des Variationsproblems der ebenen Affingeometrie. Goldmark 0·6
3. Salomon, Wilhelm. Die Intensitäten alluvialer und diluvialer geologischer Vorgänge und ihre Einwirkung auf die pliocäne Rumpffläche des Kraichgaues und Odenwaldes. Goldmark 1·20
4. Heffter, L. Zur absoluten Geometrie, Goldmark 0·6
5. van Werveke, L. Über die Entstehung der lothringischen Lehme und des mittelrheinischen Lößes. Goldmark 1·50
6. Krull, Wolfgang. Die verschiedenen Arten der Hauptidealringe. Goldmark 0·50
7. Roeser, Ernst. Übergang von der nichteuklidischen Streckentrigonometrie zur Winkelmessung. Goldmark 0·30
8. Wellstein, Julius. Zur Differentialgeometrie der isotropen Kurven. Goldmark 1·0
9. Ewald, Rudolf. Die geodynamischen Erscheinungen des kristallinen Odenwaldes als Beispiel einer geoisostatischen Ausgleichsschwingung. Goldmark 1·50

Abteilung B. Biologische Wissenschaften.

Jahrgang 1923.

1. Kossel, A. und R. E. Gross. Über die Darstellung und quantitative Bestimmung des Arginins. Goldmark 0·3

Druck von Hermann Böhlaus Nachfolgern Hof-Buchdruckerei G. m. b. H. Weimar.